

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN

CINÉTICA QUÍMICA **APLICANDO LOS** **PRINCIPIOS DE** **LA QUÍMICA VERDE** **(ACTIVIDADES EXPERIMENTALES** **PARA QUÍMICA INDUSTRIAL)**



Edición  **FESC**

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS QUÍMICAS
SECCIÓN DE FISICOQUÍMICA
PROYECTO PAPIME PE102111

CINÉTICA QUÍMICA APLICANDO LOS PRINCIPIOS
DE LA QUÍMICA VERDE
(ACTIVIDADES EXPERIMENTALES PARA QUÍMICA
INDUSTRIAL)

CARRERA: QUÍMICA INDUSTRIAL
ASIGNATURA: CINÉTICA QUÍMICA
CLAVE DE LA CARRERA: 214
CLAVE DE LA ASIGNATURA:

Yolanda Marina Vargas Rodríguez
Adolfo Eduardo Obaya Valdivia
Guadalupe Iveth Vargas Rodríguez
Alejandra Rodríguez Pozos

Abril de 2013

AGRADECIMIENTOS

Este manual se realizó con fondos de la UNAM-DGAPA del Programa de Apoyo a Proyectos para la Innovación y Mejoramiento de la Enseñanza: PAPIME PE 102111 Experimentos de Cinética Química y Catálisis (un enfoque de la Química Verde).

ÍNDICE

PRÓLOGO	7
GLOSARIO.....	9
INTRODUCCIÓN	13
OBJETIVOS GENERALES DE LA ASIGNATURA	15
OBJETIVOS DEL CURSO EXPERIMENTAL	15
LISTA DE PRÁCTICAS Y UNIDADES TEMÁTICAS	16
CANTIDAD Y TIPO DE RESIDUOS GENERADOS EN LAS ACTIVIDADES EXPERIMENTALES	17
NORMAS DE LABORATORIO (REGLAMENTO INTERNO DE LOS LABORATORIOS DE FÍSICOQUÍMICA.....	18
APÉNDICE A. REACTIVOS UTILIZADOS EN LAS ACTIVIDADES EXPERIMENTALES	19
APÉNDICE B. QUÍMICA VERDE EN LOS EXPERIMENTOS DE LABORATORIO.....	20
APÉNDICE C. EL DIAGRAMA DE FLUJO COMO UN SEMÁFORO DE SEGURIDAD ECOLÓGICA DE LOS EXPERIMENTOS DE LABORATORIO	24
ACTIVIDADES EXPERIMENTALES DE LABORATORIO	31
No. 1 Cinética de hidrólisis de acetato de etilo	33
No. 2 Cinética de la “Reacción Reloj” de yodo con persulfato.....	41
No. 3 Cinética de reacción entre fenolftaleína e hidróxido de sodio.....	50
No. 4 Cinética de reacción entre los iones férrico y iones yoduro.....	58
No. 5 Efecto de la temperatura en la rapidez de la reacción.....	65
No. 6 Yodación de acetona.....	72
No. 7 Descomposición de urea por ureasa.....	78
No. 8 Cinética de adsorción de azul de metileno.....	89
No. 9 Cinética de adsorción antocianinas del jugo de arándano en bentonita.....	97
No. 10 Descomposición del peróxido de hidrógeno.....	106
PROYECTO.....	113

PRÓLOGO

La Cinética Química y la Catálisis son temas fundamentales en los programas de estudio de las Ciencias Químicas, Biológicas, Farmacéuticas e Ingenierías. La Cinética Química se aplica al estudio de: mecanismos de reacción, estabilidad e incompatibilidad de fármacos, procesos de absorción, distribución y eliminación de fármacos. En tanto que la catálisis es de importancia para el estudio de los procesos metabólicos y para el diseño de reactores homogéneos y heterogéneos. Industrialmente los procesos catalíticos se utilizan en la producción de combustibles para automóviles, camiones y aviones, en la síntesis de materiales poliméricos, para la salud se obtienen fármacos e intermediarios, para la agricultura se producen fertilizantes, herbicidas y pesticidas, para la alimentación se generan margarinas, etcétera

La carrera de Química Industrial, presenta en el plan de estudios la asignatura de Cinética Química, en donde se estudian los tópicos de Cinética Química y la Catálisis. Es importante mencionar, que el manual de experimentos de esta asignatura fue originalmente desarrollado con experimentos clásicos de la literatura, estos experimentos aunque cumplen con los objetivos académicos, generan una gran cantidad de residuos.

Por lo anterior, para reducir el impacto económico y medioambiental que presenta el tratamiento y disposición de los residuos del laboratorio, en la FESC-UNAM, desde hace algunos años se han venido haciendo esfuerzos por desarrollar nuevos experimentos aplicando los principios la química verde en la enseñanza experimental.

Adicionalmente, para disminuir el costo de los experimentos, reducir el nivel de riesgo al utilizar sustancias tóxicas, minimizar el número de accidentes, hacer conciencia sobre la contaminación y conservación del medio ambiente y propiciar la utilización racional de recurso, en este material se han adaptado algunos experimentos tradicionales, y se han diseñado nuevos experimentos con el enfoque de la química verde, sin perder de vista el objetivo de lograr los aprendizajes significativos del curso. En el Manual se presentan 10 experimentos: de cinética química, influencia de la temperatura en la rapidez de la reacción, catálisis enzimática, catálisis homogénea y catálisis heterogénea, aplicando los principios de la química verde de laboratorio.

Cabe hacer mención, que al realizar los diez experimentos, se obtuvo una reducción de los residuos líquidos generados, de 1300 mL (del manual anterior) a 465 mL. De estos, 358 mL (80.45%) ahora son soluciones acuosas con solutos biodegradables, 16 mL (3.6 %) son soluciones acuosas de hidróxido de sodio, reutilizables para el mismo experimento o para neutralizar residuos ácidos y 71 mL (15.96 %) son soluciones acuosas que se confinan para tratamiento posterior.

En cuanto a los residuos sólidos, se redujeron en 33% (de 3.0 a 2.008 g), de los cuales 1 g es biodegradable (residuos de frijol de soya), 4 mg de bentonita contiene azul de metileno adsorbido y es confinado (0.2%), 4 mg de bentonita contiene antocianinas adsorbidas, siendo

un material ecoamigable (0.2%) y 1 g de óxido de manganeso que es recuperado y reutilizado (49.8 %).

Agradecemos a Rodrigo Tarkus Patiño Díaz, Beatriz Uribe Chavarría, Anabel Hernández Escamilla, María Catalina Téllez Martínez, Lourdes Ramos Olmos y Alfonso Sánchez Reyes, que a través de programas de servicio social y/o desarrollo de tesis, nos apoyaron en la experimentación de las prácticas. A los técnicos académicos Jaime Pérez-Huerta y Raymundo Garduño Monroy, por el apoyo técnico.

Se agradece a la Cátedra Educación Investigación de las Ciencias y al Programa de Servicio Social "Cinética y Catálisis" con claves 2011-12/41-2203 y 2012-12/41-2203.

YOLANDA MARINA VARGAS RODRÍGUEZ
ADOLFO EDUARDO OBAYA VALDIVIA
GUADALUPE IVETH VARGAS RODRÍGUEZ
ALEJANDRA RODRÍGUEZ POZOS

GLOSARIO

A	Reactante A
$[A]$	Concentración del reactante A
A_o	Concentración inicial de reactante A
A	Factor pre-exponencial o de frecuencia en la ecuación de Arrhenius
<i>ANSI</i>	Instituto Nacional Americano de Estandarización (por sus siglas en inglés, American National Standardization Institute)
<i>BJH</i>	Bjerrum-Joyner-Halenda
<i>BET</i>	Brunauer-Emmet-Teller
$^{\circ}C$	Grados Celsius
$[CH_3COCH_3]$	Concentración molar inicial de acetona
<i>CMYK</i>	Cyan, Magenta, Amarillo y negro o llave (por su siglas en inglés de: Cyan, Magenta, Yellow, Black or Key)
CO_2	Dióxido de carbono
E	Enzima
E	Factor de eficiencia de Sheldo
<i>EA</i>	Economía atómica
E_a	Energía de activación
E_m	Factor de eficiencia en mas
E_v	Factor de eficiencia en volumen
<i>EPA</i>	Agencia de Protección Medioambiental (por sus siglas en inglés, Environmental Protection Agency)
<i>ES</i>	Complejo enzima-sustrato
E_v	Factor de eficiencia en volumen
F	Fenolftaleína
FNa_2	Fenolftaleína disódica
FNa	Fenolftaleína monosódica
FNa_3	Fenolftaleína trisódica
Fe^{3+}	Ión férrico
Fe^{2+}	Ión ferroso

$[Fe^{3+}]_0$	Concentración molar inicial de iones hierro(III)
$Fe(NO_3)_3$	Nitrato férrico
g	Gramos
HNO_3	Ácido nítrico
HI	Ácido yodihídrico
HCO_3^-	Ión bicarbonato
H_3O^+	Ión hidronio
$H_2O_{2(ac)}$	Peróxido de hidrógeno acuoso
$[I^+]_0$	Concentración molar inicial de iones yoduro
$[I_2]_0$	Concentración molar inicial de yodo
I_3^-	Ión triyoduro
I^-	Ión yoduro
ISO	Organización Internacional para la Estandarización (por sus siglas en inglés, International Organization for Standardization)
K	Constante de Boltzmann
K^+	Ión potasio
k	Constante de rapidez
Kg	Kilogramo
KI	Yoduro de potasio
K_M	Constante de Michaelis
KNO_3	Nitrato de potasio
$K_2S_2O_8$	Persulfato de potasio
$\ln$	Logaritmo natural
M	Concentración en Molaridad
M	Masa molecular del producto en la ecuación de economía atómica
m	Masa molecular de los reactantes en la ecuación de economía atómica
m	Molecularidad en la ecuación de Eyring
mL	Mililitros
$\min$	Minutos
mm	Milímetros

MnO_2	Oxido de manganeso
n	Orden de reacción global
$NaCl$	Cloruro de sodio
$NaOH$	Hidróxido de sodio
Na_2SO_4	Sulfato de sodio
$Na_2S_2O_3$	Tiosulfato de sodio
NH_4^+	Ión amonio
NH_4^+	Ión amonio
nm	Nanómetros
NO_3^-	Ión nitrato
$O_{2(g)}$	Oxígeno gas
$[OH^-]$	Concentración de hidróxido de sodio
pH	Potencial de hidrógeno
ppm	Partes por millón
$PQVCE$	Principios de la Química Verde que Cumple el Experimento
R	Constante universal de los gases
r^2	Coeficiente de correlación
r	Rapidez de reacción
r_o	Rapidez inicial
$r_{máx}$	Rapidez máxima
RGB	Rojo, verde y amarillo (por sus siglas en inglés, Red, Green, Blue)
$r.p.m$	Revoluciones por minuto
s	Segundo
$[S]$	Concentración inicial de sustrato en molaridad
$S_2O_8^{2-}$	Ión persulfato
SO_4^{2-}	Ión sulfato
$S_4O_6^{2-}$	Ión tetrationato
$S_2O_3^{2-}$	Ión tiosulfato
T	Temperatura absoluta
t	Tiempo

$t_{1/2}$	Tiempo de vida media
$t_{3/4}$	Tiempo de vida tres cuartos
$t_{1/4}$	Tiempo de vida un cuarto
$t_{1/3}$	Tiempo de vida un tercio
<i>VIS</i>	Visible
<i>vs</i>	Versus
v/v	Volumen/volumen
<i>x</i>	Concentración de reactante que reacciona a tiempo <i>t</i>
X_a	Fracción reaccionante del reactante A, a tiempo <i>t</i>
α	Orden de reacción respecto al reactante A
β	Orden de reacción parcial del reactante
$\Delta G^\ddagger$	Energía libre de Gibbs de activación
$\Delta H^\ddagger$	Entalpía de activación
$\Delta S^\ddagger$	Entropía de activación
$\Delta U^\ddagger$	Energía interna de activación
μ	Fuerza iónica
%	Por ciento
<	Menor que
>	Mayor que

INTRODUCCIÓN

El Manual de actividades experimentales de Cinética Química de la carrera de Química Industrial, presenta dos tipos de actividades experimentales, la primera es de actividades experimentales específicas y la segunda de actividades experimentales a desarrollarse en forma de proyectos.

Previo a la descripción de los experimentos, en el manual se describe a la química verde y sus doce principios aplicados a los experimentos de laboratorio. Además, se presentan algunas reglas para elaborar un diagrama de flujo ecológico y una serie de matices que van desde el rojo hasta el verde, los cuales serán utilizados como fondo de cada uno de los símbolos del diagrama de flujo, indicando según el color, el número de principios de la química verde que cumple el proceso y de esta forma utilizar de forma visual, al diagrama de flujo ecológico como un semáforo para evaluar que tan respetuoso es con el medio ambiente y con la salud un experimento de laboratorio.

Adicionalmente, en función de la disposición de los residuos generados, se presentan tres colores que se utilizan también como fondo en los símbolos correspondientes a los residuos.

El punto central de este manual, en el enfoque de la química verde, es evitar la utilización de sustancias auxiliares, para ello, el avance de las reacciones de estos experimentos, se realiza por métodos fisicoquímicos (espectrofotometría, conductividad, potenciometría y presión de gas) en lugar de reacciones volumétricas de cuantificación.

Para reducir la cantidad de residuos, los volúmenes de las reacciones se minimizaron al volumen requerido para el llenado de la celda del espectrofotómetro, para cubrir la celda de conductividad o el electrodo. En el experimento que no fue posible evitar las sustancias auxiliares, se utilizó la yodometría como “reacción reloj”, para minimizar las sustancias auxiliares.

Con el fin de evitar la contaminación del medio ambiente y a la salud, las metodologías han sido diseñadas y/o adaptadas para ser menos peligrosas, utilizando materiales menos tóxicos, disminuyéndose las concentraciones de reactivos para tener concentraciones suficientemente diluidas que se ajusten a la ecuación de Beer-Lambert. Algunos experimentos generan disoluciones acuosas con solutos biodegradables o son disoluciones reutilizables.

Con el objetivo de utilizar la menor cantidad de energía, los experimentos se llevan a cabo a temperatura y presión ambiente, a excepción de los experimentos de efecto de temperatura en la rapidez de la reacción y cinética enzimática.

Con base en lo anterior se presentan diez experimentos, en cada uno de ellos se determinan parámetros cinéticos tales como constante de reacción, orden de reacción, constante de Michaelis, rapidez máxima, energía, entropía, entalpía, energía interna y energía libre de Gibbs de activación, además de estudio de mecanismos de reacción. En cada uno de los experimentos se aplican diversos métodos de determinación de órdenes de reacción, tanto integrales como diferenciales.

Cada experimento se presenta en un formato que contiene los siguientes puntos:

1. Número y título de la actividad práctica
2. Esquema de reacción
3. Introducción
4. Objetivos académicos
5. Objetivos del enfoque de la química verde
6. Problema integrador
7. Actividades previas a la actividad experimental práctica
8. Equipo(s), reactivo(s), y materiale(s)
9. Procedimiento experimental
10. Orientaciones para el tratamiento y disposición de los residuos
11. Tablas de resultados experimentales
12. Instrucciones para la elaboración del reporte
13. Actividades complementarias
14. Bibliografía
15. Hoja de resultados para el profesor

Adicionalmente, a través del texto el lector encontrará una serie de preguntas para hacer reflexionar al estudiante, denominadas actividades complementarias que pretenden el desarrollo de competencias profesionales complementarias basadas en ejercicios de investigación. Se recomienda enfáticamente que el lector las conteste antes de seguir adelante, pues ello le será muy útil en el aprendizaje de esta materia.

En la segunda parte del manual, se presentan la definición de un proyecto de laboratorio, el tipo de proyecto que se deben realizar, la selección del proyecto, el protocolo, informe y presentación del mismo.

OBJETIVOS GENERALES DE LA ASIGNATURA

Al finalizar el curso, el alumno será capaz de:

- a) Comprender y utilizar los métodos y técnicas experimentales más relevantes para el estudio cinético de las reacciones químicas.
- b) Valorar la importancia de la Catálisis para la industria y adquirirá conocimientos actuales y tecnológicos

OBJETIVOS DEL CURSO EXPERIMENTAL

- Comprender y aplicar modelos matemáticos, a partir de los datos obtenidos en el laboratorio, para describir la rapidez de las reacciones químicas.
- Interpretar los fenómenos que ocurren en el transcurso de una reacción química.
- Valorar la importancia de la Catálisis en la industria y su relación con la Química Verde.
- Entender la importancia de la Química Verde en el diseño de experimentos.
- Hacer conciencia sobre la contaminación y conservación del medio ambiente.
- Propiciar la utilización racional de recursos.
- Desarrollar habilidades para trabajar en el laboratorio con mayor precisión.
- Reducir el nivel de riesgo de sustancias tóxicas.
- Minimizar el número de accidentes.
- Reducir la cantidad de residuos.

Tabla 1. Lista de prácticas y unidades temáticas

No.	Título de la Práctica de Laboratorio	Número y Nombre de la Unidad Temática en el Programa de la Asignatura	Aprendizajes Significativos
1	Cinética de hidrólisis de acetato de etilo	1. Cinética química.	Orden de reacción global Método integral gráfico
2	Cinética de la reacción reloj de yodo	1. Cinética química.	Efectos termodinámicos y cinéticos que rigen una reacción química. Pseudo orden de reacción Método de Powell y de determinación de constantes
3	Cinética de decoloración de fenoltaleína con hidróxido de sodio	1. Cinética química.	Orden de reacción parcial a partir de la constante de rapidez condicional Método de tiempo de vida media o fraccional
4	Cinética de reacción entre el ión férrico y el ión yoduro	1. Cinética química.	Órdenes de reacción parcial Método rapidez inicial
5	Hidrólisis básica de acetato de etilo en función de la temperatura	2. Teorías de la rapidez de reacción.	Energía de activación Factor de frecuencia $\Delta H^\ddagger$, $\Delta U^\ddagger$, $\Delta S^\ddagger$ y $\Delta G^\ddagger$
6	Yodación de acetona	3. Catálisis homogénea (ácido base)	Catálisis Homogénea Ácido base Mec.de reacción Método de aislamiento de
7	Descomposición de la urea por ureasa de frijol de soya	3. Catálisis.(enzimática)	Ostwald Cinética enzimática Temperatura de actividad máxima Cálculo de $r_{\text{máxima}}$ Determinación de K_M
8	Cinética de adsorción de azul de metileno sobre bentonita	3. Catálisis (heterogénea)	Catálisis heterogénea Orden de la cinética de adsorción Método integral gráfico
9	Cinética de adsorción de jugo de arándano sobre bentonita	Unidad 3. Catálisis (heterogénea)	Catálisis heterogénea Orden de la cinética de adsorción Método integral gráfico
10	Descomposición de peróxido de hidrógeno por óxido de manganeso	Unidad 3. Catálisis (heterogénea)	Catálisis heterogénea Mec. de reacción Método de van't Hoff

Tabla 2. Cantidad y tipo de residuos generados en las actividades experimentales No. 1-10

No	Título	Técnica de análisis	Cantidad de Residuos	Tipo de residuos
1	Cinética de hidrólisis de acetato de etilo con hidróxido de sodio	Potenciometría	10 mL	Disoluciones acuosas con solutos biodegradables
2	Cinética de la reacción reloj de yodo de persulfato con yoduro	Yodometría	10 mL	Tratamiento
3	Cinética de decoloración de fenolftaleína con hidróxido de sodio	Espectrofotometría	4 mL 16 mL	Agua Reutilizable
4	Cinética de reacción entre el ión férrico y el ión yoduro	Espectrofotometría	4 mL 45 mL	Agua Tratamiento
5	Hidrólisis básica de acetato de etilo en función de la temperatura	Potenciometría	20 mL	Disoluciones acuosas con solutos biodegradables
6	Yodación de acetona	Espectrofotometría	4 mL 20 mL	Agua Tratamiento
7	Descomposición de urea por ureasa de frijol de soya	Conductividad	220 mL 1.0 g	Disoluciones acuosas con solutos biodegradables Sólido biodegradable
8	Cinética de adsorción de azul de metileno en bentonita	Espectrofotometría	4 mL 4 mg	Agua Adsorbente requiere tratamiento
9	Cinética de adsorción de antocianinas de jugo de arándano en bentonita	Espectrofotometría	4 mL 4 mL 4 mg	Agua Disoluciones acuosas con solutos biodegradables Sólido con adsorbato biodegradable
10	Descomposición de peróxido de hidrógeno por óxido de manganeso	Volúmen de gas	100 mL 1 g	Agua Catalizador reutilizable

465 mL de residuos líquidos
2.008 g de residuos sólidos

NORMAS DE LABORATORIO (REGLAMENTO INTERNO DE LOS LABORATORIOS DE FISICOQUÍMICA)

El laboratorio es un lugar potencialmente peligroso si no se siguen ciertas normas generales de seguridad que se recomiendan a continuación:

1. Es obligación del alumno revisar LAS HOJAS DE SEGURIDAD, antes de realizar la actividad experimental, para conocer las propiedades físicas, químicas y toxicológicas de las sustancias que se utilizan, así como tener conocimiento de su uso, manejo y almacenamiento.
2. Se recomienda que el alumno trabaje en el laboratorio solo cuando su profesor o persona responsable de dicho laboratorio este presente, con el propósito de tener una persona que supervise posibles riesgos y ayude en caso necesario. En caso de emergencia consultar acciones de emergencia o primeros auxilios en LAS HOJAS DE SEGURIDAD.
3. Son requisitos indispensables para el trabajo experimental:
 - Bata (obligatorio).
 - Lentes de protección y guantes (opcional).

Aquellos estudiantes que usan lentes de contacto, deberán usar espejuelos de protección de forma obligatoria o traer anteojos el día de la actividad experimental. Es obligación del alumno revisar en LAS HOJAS DE SEGURIDAD de los reactivos y/o productos con los que vaya a trabajar, el equipo de protección personal que debe usar en cada sesión experimental.
4. No se debe fumar, ya que un descuido puede ocasionar una explosión; por lo general se encuentran en el ambiente vapores de sustancias volátiles y de bajo punto de inflamabilidad.
5. No se deben encender cerillos o mecheros, a excepción de que así lo requiera la sesión experimental.
6. El lugar de trabajo debe estar despejado de libros, mochilas, prendas, etc.; sólo estarán el equipo y las sustancias que se van a usar en el experimento, el manual de prácticas, calculadora y un cuaderno de anotaciones (Bitácora de trabajo).
7. No se permite consumir alimentos y bebidas en el laboratorio.
8. Se debe tener cuidado al manejar sustancias peligrosas como ácidos, álcalis, sales venenosas, disolventes, etc. En caso de algún percance avisar inmediatamente al profesor.
9. Al manejar equipos, materiales y reactivos, se debe ser cuidadoso en su traslado y conexión. Se recomienda revisar el instructivo antes de la actividad experimental y preguntar al profesor las dudas que se tengan sobre el particular.
10. La solicitud de los equipos, materiales y reactivos se realiza con el llenado del vale del laboratorio y presentando la credencial otorgada por la UNAM.
11. Si se rompe o daña material y/o equipo, éste debe reintegrarse al laboratorio antes de concluir el curso experimental.
12. El alumno tiene la obligación de estudiar las ORIENTACIONES ACERCA DEL TRATAMIENTO Y DISPOSICIÓN DE LOS RESIDUOS, con el propósito de saber qué hacer con los residuos o desechos producidos en cada sesión experimental. Los residuos de los experimentos que deban almacenarse, deben ser depositados en los recipientes etiquetados que le indique el profesor. Tenga cuidado de no confundirse y no mezclar.
13. Una vez terminada la sesión experimental, el alumno deberá dejar limpio su lugar de trabajo y asegurarse de no dejar basura en las tarjas de las mesas de trabajo ni en las de lavado de material.
14. El alumno debe lavarse las manos con agua y jabón antes de salir del laboratorio.

APÉNDICE A

REACTIVOS UTILIZADOS EN LOS ACTIVIDADES EXPERIMENTALES No. 1-10

1. Acetato de etilo
2. Acetona
3. Ácido clorhídrico
4. Ácido nítrico
5. Almidón
6. Azul de metileno
7. Bentonita activada
8. Cloruro de sodio
9. Etanol
10. Fenolftaleína
11. Frijol de soya
12. Hidróxido de sodio
13. Jugo de arándano
14. Nitrato de potasio
15. Nitrato férrico
16. Óxido de manganeso
17. Peróxido de hidrógeno
18. Persulfato de potasio
19. Sulfato de sodio
20. Tiosulfato de sodio
21. Urea
22. Yodo
23. Yoduro de potasio

APÉNDICE B

QUÍMICA VERDE EN LOS EXPERIMENTOS DE LABORATORIO

A principios de la década de 1990, Anastas y Co. de la Agencia de Protección Medioambiental (EPA) de los EE UU, acuñan el concepto de QUÍMICA VERDE que se ocupa del diseño de productos o procesos químicos que reduzcan y eliminen el uso y producción de sustancias peligrosas.

En 1995 la EPA y la American Chemical Society firman un acuerdo de colaboración para desarrollar y difundir material relacionado a la química verde, especialmente en los niveles de bachillerato y licenciatura. A partir de ese momento diversos materiales han sido descritos en la literatura, libros, artículos, revistas, casos de estudios, páginas Web y conferencias, básicamente enfocados a la química orgánica, aunque también se encuentran otros materiales dedicados a la química analítica.

Anastas y Warner (1998), publican el libro Química Verde: Teoría y Práctica, en este se exponen criterios que nos ayudan a valorar cuán respetuoso es con el medio ambiente un producto químico, reacción o proceso, denominados los Doce Principios de la Química Verde. Estos principios se enunciaron enfocados a procesos industriales, en donde el objetivo es obtener un producto comercial (Tabla B.1).

En 2011, Obaya y Vargas presentan algunas consideraciones a los principios de la química verde para aplicarlos en el diseño de experimentos de laboratorio de química (Tabla B.2). En donde se discute la importancia de eliminar las sustancias auxiliares, en el seguimiento de reacciones o en la cuantificación se preferirá métodos físicoquímicos (conductividad, absorbancia, etcétera.) en lugar de valoraciones químicas y en el caso de que se utilicen que sean lo más inocuos posibles, de producir residuos biodegradables, de experimentos en los que los residuos contengan el menor número de componentes para que sea más sencillo su tratamiento o disposición, que la toxicidad de las sustancias químicas participantes sea minimizada, etcétera. Adicionalmente, se indicó el valor de presentar un esquema ecológico, para facilitar la identificación y naturaleza de los residuos generados en cada experimento.

Tabla B.1. Principios de la Química Verde

1	Prevenir y/o minimizar residuos	Es preferible evitar la producción de un residuo que tratar de destruirlo una vez que se haya formado.
2	Economía atómica	Los métodos de síntesis deberán diseñarse de manera que incorporen al máximo, en el producto final, todos los materiales usados durante el proceso.
3	Diseñar experimentos que utilicen y generen sustancias con el mínimo de toxicidad	Siempre que sea posible, los métodos de síntesis deberán de diseñarse para utilizar y generar sustancias que tengan poca o ninguna toxicidad, tanto para el hombre como para el medio ambiente.
4	Generar productos eficaces pero no tóxicos	Los productos químicos deberán ser diseñados de manera que mantengan su eficacia a que la vez reduzcan su toxicidad.
5	Reducir el uso de sustancias auxiliares	Se evitará, en lo posible, el uso de sustancias auxiliares (disolventes, reactivos de separación, etc.) y, en el caso de que se utilicen, se intentará que sean lo más inocuas posible.
6	Disminuir el consumo energético	Los requerimientos energéticos serán catalogados por su impacto medioambiental y económico, reduciéndose todo lo posible. Se intentará llevar a cabo los métodos de síntesis a temperatura y presión ambientes.
7	Utilizar materias primas renovables	La materia prima ha de ser preferiblemente renovable en vez de agotable, siempre que sea técnica y económicamente viable.
8	Evitar derivados innecesarios	Se evitará en lo posible la formación de derivados (grupos de bloqueo, de protección/desprotección, modificación temporal de procesos físicos/químicos).
9	Preferir la catálisis	Los reactivos catalíticos (tan selectivos como sea posible) son preferibles a los estequiométricos.
10	Generar productos biodegradables	Los productos químicos se diseñarán de tal manera que al finalizar su función no persistan en el medio ambiente sino que se transformen en productos de degradación inocuos.
11	Analizar los procesos en tiempo real, para evitar la formación de sustancias peligrosas	Las metodologías analíticas serán desarrolladas para permitir un seguimiento y control en tiempo real del proceso, previo a la formación de sustancias peligrosas.
12	Minimizar el riesgo de accidentes químicos	Se elegirán las sustancias empleadas en los procesos químicos de forma que se minimice el peligro potencial de accidentes químicos, incluidas las emanaciones, explosiones e incendios.

Tabla B.2. Aplicación de los principios de la Química Verde en la enseñanza aprendizaje experimental

	Principio de la Química Verde	Enfoque en el diseño de experimentos para la enseñanza aprendizaje
1	Prevenir y/o minimizar residuos	Se deben diseñar experimentos en los que no se generen residuos o que se obtenga la menor cantidad de ellos (semimicro o microescala). Se preferirán reacciones que tengan un rendimiento alto y una buena selectividad.
2	Economía atómica:	Los métodos en lo que procedan reacciones químicas, deben diseñarse de manera que se incorporen al máximo todos los reactivos en el producto final, minimizando la formación de subproductos, por lo tanto será más sencillo disponer de un residuo..
3	Diseñar experimentos que utilicen y generen sustancias con el mínimo de toxicidad	Siempre que sea posible, utilizar materiales y generar sustancias que tengan poca o ninguna toxicidad, tanto para el hombre como para el medio ambiente..
4	Generar productos eficaces pero no tóxicos	Reducir la toxicidad de los productos o residuos, pero mantener el objetivo del experimento.
5	Reducir el uso de sustancias auxiliares	Se debe evitar, en lo posible, el uso de sustancias como: disolventes, reactivos para llevar a cabo separaciones, etcétera. En el seguimiento de reacciones o en la cuantificación se preferirá métodos físicoquímicos (conductividad, absorbancia, etcétera.) en lugar de valoraciones químicas y en el caso de que se utilicen que sean lo más inocuos posibles
6	Disminuir el consumo energético:	Se preferirán experimentos que se lleven a cabo a temperatura y presión ambiente.
7	Utilizar materias primas renovables:	La materia prima ha de ser preferiblemente renovable en vez de agotable, siempre que sea técnica y económicamente viable.
8	Evitar derivados innecesarios:	Se debe evitar en lo posible la formación de derivados (grupos de bloqueo, de protección/desprotección, modificación temporal de procesos físicos/químicos).
9	Preferir la catálisis	Se deben emplear catalizadores lo más selectivos posible, preferentemente reutilizables para experimentos posteriores, en lugar de reactivos estequiométricos.
10	Generar productos biodegradables	Se deben diseñar experimentos de tal manera que al finalizar los productos y/o residuos que se obtengan, se degraden después de su uso.
11	Analizar los procesos en tiempo real, para prevenir la contaminación	Las metodologías analíticas serán desarrolladas para permitir el análisis y el control en tiempo real del proceso (índice de refracción, potencial redox, cromatografía en capa fina, cromatografía de gases, etcétera)
12	Minimizar el riesgo de accidentes químicos:	Se deben elegir sustancias en los experimentos químicos de forma que se minimice el riesgo de accidentes químicos, incluidas las emanaciones, explosiones e incendios

BIBLIOGRAFÍA

1. Hjerensen, D.L., Boese, J.M. & Schutt, D.L. (2000) Green Chemistry and Education, *Journal of Chemistry Education*, 77 (12) 1543
2. Kirchhoff, M.M. (2001) Topics in Green Chemistry, *Journal of Chemistry Education*, 78 (12) 1577.
3. Cann, M.C. (2009) Greening the Chemistry Lecture Curriculum: Now is the Time to Infuse Existing Maistream Textbooks with Green Chemistry, *Green Chemistry Education*, cap 6, 93-102
4. Anastas, O. T. & Kirchhoff, M.M. (2002) Origins, Current Status and Future Challenges of Green Chemistry, *Acc. Chem. Res.*, 35 (9) 686-694.
5. Kirchhoff, M.M. (2009) Green Chemistry Education: Toward a Greener Day, *Green Chemistry Education*, Cap. 13, 187-194.
6. Kirchhoff, M.M. (2005) ACS NEWS: Green Chemistry School Is International Draw. *Chem. Eng. News Archive*. 83 (34), 50.
7. Klingshirnf, M. A. & Spessard, G. O. (2009) Integrating Green Chemistry into the Introductory Chemistry Curriculum, *Green Chemistry Education*, Cap. 5, 79-92.
8. Kirchhoff, M.M. (2007) Green Chemistry South of the Border. *Chem. Eng. News Archive*. 85 (3), 40.
9. Cann, M.C. & Dickneider, T. A. (2004) Infusing the Chemistry Curriculum with Green Chemistry Using Real-World Examples, Web Modules, and Atom Economy in Organic Chemistry Course. *Journal of Chemistry Education*, 81 (7) 977-980.
10. Gron, L. U. (2009) Green Analytical Chemistry: Application and Education, *Green Chemistry Education*, Cap. 7, 103-116
11. Rayne, D. E. (2011) Book Review of Green Analytical Chemistry, *J. Am. Chem. Soc.* 133 (4) 1146-1146.
12. Burtch, E.A. & Jones-Wilson, T. M. (2005) A Green Starting Material for Electrophilic Aromatic Substitution for the Undergraduate Organic Laboratory, *Journal of Chemistry Education*, 82 (4) 616-617.
13. Hooper, M.M. and DeBoef, B. (2009) A Green Multicomponent Reaction for the Organic Chemistry Laboratory. The Aqueous Passerini Reaction, *Journal of Chemistry Education*, 86 (9) 1077-1079.
14. Armenta, S. and de la Guardia, M (2011) Determination of Mercury in Milk by Cold Vapor Atomic Fluorescence: A Green Analytical Chemistry Laboratory Experiment, *Journal of Chemistry Education*, 77 (1) 488-491.

APÉNDICE C

EL DIAGRAMA DE FLUJO COMO UN SEMÁFORO DE SEGURIDAD ECOLÓGICA DE LOS EXPERIMENTOS DE LABORATORIO

C.1 Diagrama de Flujo

Se define a un diagrama de flujo como una representación de los pasos de un proceso que determina como funciona el proceso para producir un resultado. En el caso de los experimentos de laboratorio, el proceso será el desarrollo experimental del mismo y el diagrama deberá ser elaborado de forma previa al experimento. Que el alumno elabore un diagrama de flujo antes de experimentar, implica que los estudiantes se esfuercen para identificar todos los pasos del experimento de forma clara y ordenada y que se formen una visión amplia del objetivo del experimento y del tratamiento y disposición de los residuos.

Simbología del diagrama de flujo

Los símbolos, a utilizar serán los propuestos por la Organización Internacional para la Estandarización (ISO, por sus siglas en inglés) y por el Instituto Nacional Americano de Estandarización (ANSI, por sus siglas en inglés) NORMAS ANSI / ISA S 5.1- 1984 (R1992). Sin embargo, estos símbolos serán adaptados al proceso de laboratorio, de acuerdo a la Tabla C.1.

C.2 Codificación de los colores

En este apartado se propone un sistema de caracterización de colores para la realización de diagramas de flujo ecológico. Con esto se pretende dar la codificación de color que permita al alumno reconocer mediante el color de fondo de las tipografías, el sitio en el que se encuentra de la escala de colores de diagrama de flujo ecológico.

En la tabla C.1, se presentan los 13 colores seleccionados, que van desde rojo hasta el verde pasando por matices de colores intermedios. Para facilitar al alumno la identificación adecuada del color al utilizar la computadora, se presentan los códigos en el modelo de color RGB (por sus siglas en inglés de Rojo, Verde y Azul: Red, Green, Blue), para no tener confusiones del color impreso, se muestran los códigos de acuerdo al modelo CMYK (por su siglas en inglés de Cyan, Magenta, Amarillo y negro o llave: Cyan, Magenta, Yellow, Black or Key) y finalmente se da el código de Pantones correspondiente a cada color.

Tabla C.1. Símbolos y significado para la elaboración de un diagrama de flujo de un experimento de laboratorio

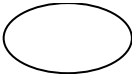
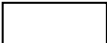
Símbolo	Significado	Aplicación en los experimentos de laboratorio
	Inicio del proceso	Se utilizará para indicar el inicio de un diagrama; de la cual sólo puede salir una línea de flujo. Llevará el título general y/o de cada etapa del experimento.
	Final del proceso	Se aplicará para indicar el final del experimento, contendrá la palabra residuos.
	Entrada General	Se empleará para indicar los reactivos que entran al proceso, el volumen, el peso y la concentración.
	Salida General	Se utilizará para indicar los productos o residuos que salen en cualquier etapa del proceso al final del mismo. Se indicará el volumen o peso de ellos, los componentes y sus composiciones respectivas y pueden salir uno o varios procesos para indicar la disposición o tratamiento de los residuos.
	Acción/Proceso General	Se destinará para dar una instrucción general que debe realizar el alumno para el desarrollo del experimento. Si es posible se debe indicar la transformación de los reactantes y concentraciones correspondientes
	Decisión	Se aplicará para la comparación de dos datos y dependiendo del resultado (falso o verdadero) se toma la decisión de seguir un camino del diagrama u otro.

Tabla C. 2. Codificación del color en función del número de Principios de la Química Verde que Cumple el Experimento o la Etapa de Proceso Indicada (PQVCE)

No. PQVCE*	Color observado	Modelo de color RGB	Modelo de color CMYK
0		237, 28, 37	0.00, 0.882, 0.844, 0.071
1		240, 81, 35	0.00, 0.663, 0.854, 0.059
2		237, 110, 5	0.00, 0.54, 0.98, 0.07
3		243, 146, 0	0.00, 0.40, 1.00, 0.05
4		249, 179, 0	0.00, 0.28, 1.00, 0.02
5		255, 210, 0	0.00, 0.18, 1.00, 0.00
6		255, 237, 0	0.00, 0.07, 1.00, 0.00
7		239, 227, 0	0.00, 0.05, 1.00, 0.06
8		214, 217, 0	0.01, 0.00, 1.00, 0.15
9		187, 207, 0	0.10, 0.00, 1.00, 0.19
10		157, 196, 26	0.20, 0.00, 0.87, 0.23
11		122, 185, 41	0.34, 0.00, 0.78, 0.27
12		79, 174, 50	0.55, 0.00, 0.71, 0.32

Cada color indica el Número de Principios de la Química Verde que Cumple el Experimento (PQVCE) (Tabla C.3, columna 1). Por ejemplo el color rojo (RGB: 237, 28, 37), indica que se cumplen cero principios de la Química Verde y el color amarillo (RGB: 255, 237, 0) muestra que el experimento cumple 6 principios.

C. 3 Clasificación de los residuos en función del tratamiento

Los residuos se clasificarán con base a su disposición como: residuos que requieren tratamiento, reutilizables y agua o disolventes acuosos con solutos biodegradables, de acuerdo a los colores en la tabla C.2.

Tabla C.3. Codificación del color en función del tipo de residuo

Tipo de residuo*	Color observado	Modelo de color RGB	Modelo de color CMYK
Residuos que requieren tratamiento		255,237,0	0.00, 0.07, 1.00, 0.00
Residuos reutilizables		187,207,0	0.10, 0.00, 1.00, 0.19
Agua o Disolventes acuosos con solutos biodegradables o biotransformables		79,174,50	0.55, 0.00, 0.71, 0.32

C. 4 Evaluación del experimento

Para determinar el número de PQVCE, se sugiere hacer un análisis del proceso global con base en los principios de la Química Verde. Es importante mencionar que durante el análisis de un experimento aislado, en ocasiones es difícil definir qué tan respetuoso es un experimento con el medio ambiente, para ello se debe hacer siempre que se pueda, un análisis comparativo desde el punto de vista de la química verde, de un experimento con el antecesor.

Para evaluar el principio número uno, prevención de residuos (Tabla b.2), es necesario determinar el Factor de eficiencia (E), del experimento global, el cual es definido como la cantidad de residuos en kg generados durante la fabricación de 1 kg de producto (ecuación .1), (Sheldon, 2003).

$$E = \frac{\text{masa de residuos (kg)}}{1 \text{ Kg de producto}} \quad (\text{C.1})$$

Este factor se definió para procesos industriales, sin embargo en los laboratorios de enseñanza experimental, en donde el objetivo se logra durante la experimentación y no necesariamente en la cantidad de producto obtenido, el cual es generalmente parte de los desechos, es necesario cuantificar los residuos por experimento, en consecuencia se definirá el Factor de Eficiencia en Masa (E_m) como la masa de residuos en kilogramos por experimento realizado (ecuación C.2).

$$E_m = \frac{\text{masa de residuos (Kg)}}{1 \text{ Experimento realizado}} \quad (\text{C.2})$$

Como en muchos experimentos es más sencillo medir la cantidad de residuos que pesarlos, se definirá el Factor de Eficiencia en Volumen (E_v), como el volumen de residuos en litros obtenidos por cada experimento realizado (ecuación C.3).

$$E_v = \frac{\text{volumen de residuos (L)}}{\text{1 experimento realizado}} \quad (\text{C.3})$$

Con las definiciones anteriores, se tendrá una referencia con la cual comparar un experimento con otro.

Para que se cumpla el principio número dos, los métodos en lo que procedan reacciones químicas, deben diseñarse de manera que se incorporen al máximo todos los reactivos en el producto fina, minimizando la formación de subproductos, por lo tanto será más sencillo disponer de un residuo.

La Economía Atómica (EA), es una medida de la incorporación de los materiales utilizados en el producto fina. El cual se obtiene dividiendo a la masa molecular del producto por la sumatoria de las masas moleculares de los reactantes, multiplicadas por el correspondiente coeficiente estequiométrico, como se muestra en la ecuación C.4. (Trost, 1991).

$$EA = \frac{M}{\sum_{i=1}^n m} \times 100 \quad (\text{C.4})$$

En cinética química y catálisis, la reacción se desarrolla en porcentajes variables durante la experimentación, pero a cierto tiempo se llevan a cabo a su máximo rendimiento, entonces será adecuado dejar reposar la reacción un tiempo razonable, para evaluar la Economía atómica. En sesiones experimentales semanales, se sugiere tratar los residuos en la sesión experimental siguiente y si la reacción finalmente procede al 100%, entonces considerar a la EA = 100% y que se cumple el principio número dos.

A partir del principio número tres la evaluación se realizará de acuerdo a los parámetros propuestos en la Tabla B.2, si el principio no aplica se considerará que sí se cumple.

C. 5 Metodología para realizar un diagrama de flujo ecológico

1. Seleccionar el experimento
2. Determinar las etapas del experimento
3. Utilizar los símbolos adecuados
4. Documentar las cantidades de reactantes a utilizar
5. Realizar el balance de materia en cada etapa del experimento
6. Investigar las propiedades físicas, químicas y toxicológicas de reactantes y productos.
7. Obtener los pictogramas de seguridad para reactantes y productos
8. Colocar pictogramas de toxicidad, en los símbolos del diagrama.
9. Calcular la cantidad de residuos en volumen o en masa, en función de factor de eficiencia
10. Determinar la Economía Atómica del experimento.
11. Investigar la biodegradabilidad de residuos.
12. Indicar el tratamiento o disposición de residuos
13. Evaluar el número de principios que cumple el experimento.
14. Colocar en un recuadro en la misma página del diagrama de flujo, los PQVCE.
15. Establecer el color de fondo que deben llevar el diagrama, con base al número de PQVCE, utilizando el sistema RGB.
16. Colocar el color de fondo de las tipografías en el diagrama de flujo.
17. Analizar el tipo de residuos (biodegradables, reutilizables, requieren tratamiento)
18. Con base a cada tipo de residuo, seleccionar y aplicar el color de fondo para los símbolos de los residuos,
19. Analizar el diagrama de flujo y concluir acerca de que tan respetuoso es el experimento a la salud y al medio ambiente.

NOTA: PARA ELABORAR EL DIAGRAMA DE FLUJO ECOLÓGICOS DE LOS EXPERIMENTOS, REVISAR LOS ELABORADOS PARA LAS ACTIVIDADES EXPERIMENTALES No. 8 Y 9.

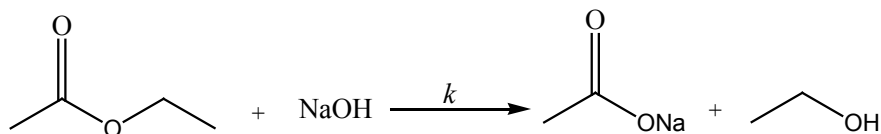
BIBLIOGRAFÍA

1. Trost, B. M. (1991) The atom economy – a search synthetic efficiency, *Science*, 254, 1471-1477.
2. Sheldon, R.A., (2003) Atom Utilization, *E*Factors and the Catalytic Solution. *R. Academic Science* 2003, 3, 541-551

ACTIVIDADES EXPERIMENTALES DE LABORATORIO

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No. 1

CINÉTICA DE HIDRÓLISIS DE ACETATO DE ETILO



Esquema 1.1.- Reacción entre acetato de etilo e hidróxido de sodio.

INTRODUCCIÓN

La hidrólisis de acetato de etilo se puede realizar en condiciones neutras, ácidas o básicas con diferente rapidez y mecanismo de reacción. A pH neutro la reacción es muy lenta. Cuando se lleva a cabo en una disolución de hidróxido de sodio, los productos generados son acetato de sodio y etanol (Esquema 1.1). El pH de la reacción depende del hidróxido de sodio y del acetato de sodio. A tiempo cero de reacción, el pH lo impone el NaOH por ser una base fuerte y estar en mayor concentración que el acetato de sodio. Por tanto si la reacción se sigue en un grado de avance menor al 50%, en donde el NaOH impone el pH, este será un indicativo de la concentración de NaOH que queda sin reaccionar.

Para conocer el orden de una reacción por ejemplo de $A \rightarrow P$, se puede utilizar el método integral gráfico, este método consiste en dos opciones:

- Trazar graficos de concentración del reactante A vs tiempo (orden cero), $\ln [A]$ vs tiempo (orden uno) y $1/[A]$ vs tiempo (orden dos). Ver Figura 1.1
- Trazar los gráficos de las funciones obtenidas de la integración de las leyes de rapidez en función del tiempo (Tabla 1.1), en donde x es la concentración del reactante que ha reaccionado a tiempo t.

En ambos casos, realizar una regresión lineal y la función que tenga la mejor r^2 , corresponde directamente al orden de reacción.

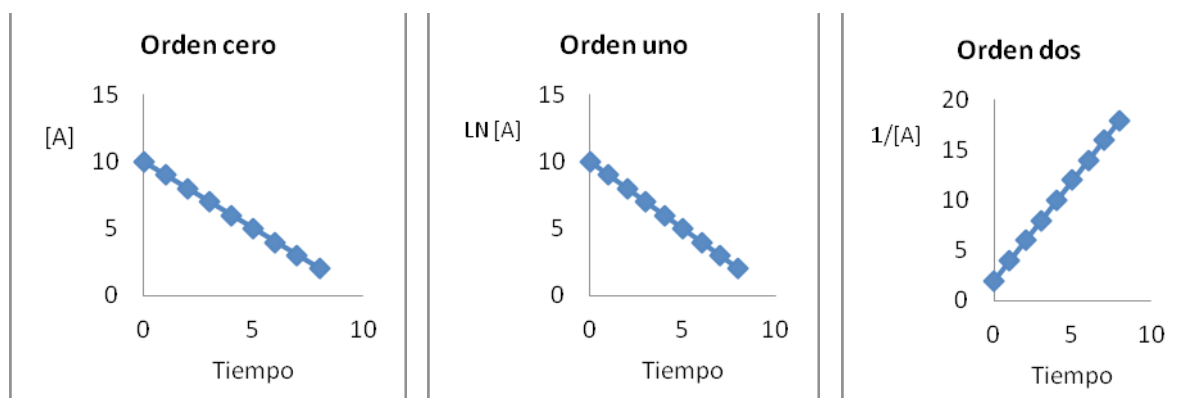


Figura 1.1 Representación directa de la concentración en función del tiempo para diferentes órdenes.

Tabla 1.1 Ecuaciones de rapidez para el método integral gráfico

ORDEN	REACCIÓN	FORMA INTEGRADA	EN FUNCIÓN DE $[OH^-]$
0	$A \rightarrow P$	$x = kt$	$x = [OH^-]_p - [OH^-]_i$
1	$A \rightarrow P$	$\ln \left[\frac{A_0}{A_t} \right] = kt$	$\ln \frac{[OH^-]_0}{[OH^-]_t} = kt$
2	$A \rightarrow P$	$\frac{x}{A_0(A_0 - x)} = kt$	$\frac{[OH^-]_p - [OH^-]_i}{[OH^-]_p [OH^-]_i} = kt$

OBJETIVOS ACADÉMICOS

- Estudiar el mecanismo de la hidrólisis básica del acetato de etilo
- Utilizar el método integral gráfico
- Seguir el avance de reacción a través de medidas de pH

OBJETIVOS DEL ENFOQUE DE LA QUÍMICA VERDE

- Minimización de residuos (1). Factor de eficiencia en volumen 0.010
- Economía atómica alta (2), 100%
- Experimento con sustancias de toxicidad reducida (3)
- Residuos con toxicidad reducida (4)
- Eliminación de sustancias auxiliares (5)
- Disminución del consumo energético (6)
- No fue necesaria la formación de grupos de bloqueo (8)
- Residuos biodegradables (10)
- Monitoreo en tiempo real del proceso (11)
- Minimización del riesgo potencial de accidentes químicos (12)

PROBLEMA INTEGRADOR

Determinar el orden global y la constante de rapidez de la reacción.

ACTIVIDADES PREVIAS AL EXPERIMENTO

Investigar cómo se realiza el cálculo de pH de bases fuertes y de fuerza media.

Estudiar el método integral gráfico.

Averiguar los mecanismos de reacción para la hidrólisis básica de ésteres.

Revisar en las hojas de seguridad las propiedades químicas, físicas y toxicológicas de reactivos y productos.

Elaborar un diagrama de flujo ecológico que incluya el tratamiento y disposición de los residuos.

Comparar el protocolo para la hidrólisis de acetato de etilo descrito en Daniels (1972) con el protocolo actual.

Analizar cada principio de la química verde para este experimento y comparar con los resultados sugeridos en los objetivos de la química verde.

Utilizar las cartas de color en el diagrama de flujo, de acuerdo a la metodología descrita en los apéndices.

EQUIPO(S), REACTIVO(S), MATERIAL(ES)

MATERIAL	EQUIPO	REACTIVOS
Por equipo: 1 Tubo de ensayo de 150 mm por 20 mm 1 Soporte universal con pinzas 1 Cronómetro 2 Pipetas volumétricas de 5 mL 2 Vasos de precipitados de 10 mL 1 Piseta 1 Barra de agitación magnética 1 Termómetro	Por equipo: 1 Potenciómetro con electrodo de vidrio 1 Parrilla con agitación magnética 1 Termóstato	Por equipo: 5 mL de disolución 0.2 M de hidróxido de sodio 5 mL de disolución 0.2 M de acetato de etilo, recién preparada

PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

1. En el tubo de ensayo perfectamente limpio y seco, coloque una barra de agitación magnética y adicione 5 mL de disolución de NaOH 0.2 M. Introducir el tubo en un termóstato a temperatura ambiente y fije el tubo al soporte universal (Figura 1.2).
2. Mida con pipeta volumétrica 5 mL de acetato de etilo y vacíe en un vaso de pp de 10 mL, agregar rápidamente la disolución medida de acetato de etilo al tubo de ensayo y poner en marcha el cronómetro en el momento en que ha sido agregada la mitad de la disolución de acetato de etilo. Inmediatamente introduzca el electrodo al tubo.
3. Haga medidas de pH para la reacción a los siguientes tiempos: 0.25, 0.5, 1, 1.5, 2, 3, 5, 7, 10, 12, 14, 16, 18 y 20 min.



Figura 1.2.- Montaje experimental de la reacción de hidrólisis de acetato de etilo

ORIENTACIONES PARA EL TRATAMIENTO Y DISPOSICIÓN DE RESIDUOS

Guarde los residuos en frasco etiquetado, en la siguiente sesión la reacción se habrá llevado a cabo al 100%. Los residuos son biodegradables y no tóxicos. Depositarlos en la tarja.

TABLAS DE RESULTADOS EXPERIMENTALES

1. Datos de pH en función del tiempo (Tabla 1.2).

Tabla 1.2 Resultados de pH en función del tiempo de reacción

TIEMPO (min)	pH	TIEMPO (min)	pH
1/4		7	
1/2		10	
1		12	
1.5		14	
2		16	
3		18	
5		20	

INSTRUCCIONES PARA LA ELABORACIÓN DEL REPORTE

1. En una hoja de cálculo o en papel milimétrico, elabore un gráfico de pH en función del tiempo. Ajuste a una ecuación polinómica y determinar el pH a tiempo cero.
2. Plantee la ecuación cinética de la reacción.
3. Desarrolle la tabla de cantidades molares de reacción a tiempo cero y tiempo t.
4. Calcule la concentración de hidróxido de sodio a los tiempos indicados en la tabla de resultados.

Tabla 1.3 Cálculo de la concentración remanente de hidróxido de sodio

TIEMPO (min)	pH	pOH	$[OH^-]$	$\ln[OH^-]$	$\frac{1}{[OH^-]}$
0					
1/4					
1/2					
1					
2					
3					
5					
7					
10					
12					
14					
16					
18					
20					

5. Trace los gráficos de $[OH^-]$, $\ln [OH^-]$ y $1/[OH^-]$ vs tiempo. Realice una regresión lineal a los gráfico anteriores y determinar el orden de reacción.

6. De acuerdo a la tabla de cantidades molares, calcule la concentración de hidróxido de sodio

que ha reaccionado a tiempo t (x), el $\ln \left[\frac{A_0}{(A_0 - x)} \right]$ y la reacción de. $\frac{x}{A_0(A_0 - x)}$

Tabla 1.4 Datos para la determinación del orden de reacción

TIEMPO (min)	x	$\ln \left[\frac{A_0}{(A_0 - x)} \right]$	$\frac{x}{A_0(A_0 - x)}$
0			
1/4			
1/2			
1			
2			
3			
5			
7			
10			
12			
14			
16			
18			
20			

7 Determine el orden de reacción por el método integral gráfico , utilizando los resultados de la tabla anterior.

8 Con base al mecanismo de reacción reportado en la bibliografía y a sus resultados de orden de reacción, ¿por qué se puede considerar la hidrólisis del acetato de etilo como una reacción elemental?

9. Discuta sus resultados y concluya

ACTIVIDADES COMPLEMENTARIAS

1. *Explica la variación del logaritmo de la constante de rapidez con el pH para la hidrólisis básica de un éster.*
2. *Investiga qué proceso industrial utiliza la hidrólisis de ésteres de ácidos grasos por hidróxido de sodio.*
3. *El metóxido de sodio también hidroliza esterés de ácidos grasos, ¿En qué proceso se aplica?*

BIBLIOGRAFÍA

- Daniels, F., Alberty, R. A., Williams, J. W., Cornwell, C. D., Bender, P. & Harriman, J. E. (1972). Curso de fisicoquímica experimental. (7ª ed.). México: McGraw-Hill.
- Obaya, A., Vargas-Rodríguez, Y. M. (2011) La Enseñanza Experimental de la Química desde una Perspectiva Interdisciplinaria y Ecológica. En Química Verde Experimental (27-34). México. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Smith, M. B. & March, J. (2007) March's Advanced organic chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure (6th Ed.). Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc.
- Vargas, M. & Obaya, A. (2005). Cálculo de parámetros de rapidez en cinética química y enzimática. México: Universidad Nacional Autónoma de México
- Vargas, M & Obaya, A. (2011). Cinética Química y Catálisis Verde. En Química Verde Experimental (pp. 189-215). México: Universidad Nacional Autónoma de México.
- Vargas-Rodríguez, Y. M., Obaya, A, Vargas, G. I. (2012) Regresión polinomial una competencia indispensable para el tratamiento de datos en cinética química. 4º Congreso Internacional Sobre la Enseñanza y Aplicación de las Matemáticas. FES C UNAM 2012.

HOJA DE RESULTADOS PARA EL PROFESOR
ACTIVIDAD EXPERIMENTAL NO. 1
CINÉTICA DE HIDRÓLISIS DE ACETATO DE ETILO

Integrantes del quipo:

1. _____
 2. _____
 3. _____
 4. _____

Profesor _____
 Carrera _____
 Grupo _____
 Semestre _____
 Fecha _____

Tabla 1.1 Resultados de conductividad en función del tiempo de reacción

TIEMPO (min)	pH	TIEMPO (min)	pH
1/4		7	
1/2		10	
1		12	
1.5		14	
2		16	
3		18	
5		20	

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No. 2

CINÉTICA DE LA “REACCIÓN RELOJ” DE YODO CON PERSULFATO



Esquema 2.1.- Reacción entre yoduro y persulfato

INTRODUCCIÓN

Las “reacciones reloj”, son aquéllas en donde la súbita presencia de coloración de la mezcla de reacción, indica que se ha consumido una cierta cantidad de uno de los reactivos, lo que significa que está realizando una valoración in situ de uno de los productos.

La espontaneidad de la reacciones redox se analizan directamente en una escala de potenciales. Una vez que se conoce que la reacción es espontánea, el siguiente punto a analizar es con cuanta rapidez se forman los productos, objetivo que se logra a través de un estudio cinético. Sin embargo cuando se tienen una mezcla de sustancias en donde se pueden presentar diferentes reacciones de forma espontánea, es necesario conocer que reacciones se llevan a cabo con mayor rapidez que otras, para poder hacer un análisis de las mismas.

El método de representación Powell, es un método integral y únicamente se aplica cuando la ecuación de rapidez tiene la forma:

$$r = k[A]^n$$

En donde se utilizan los parámetros adicionales α y ϕ definidos com

$$X_A = \frac{\text{Conc.}_a_tiempo_t}{\text{Conc.}_inicial} = \frac{[A]}{[A]_0} = \frac{A_0 - x}{A_0} \quad (2.1)$$

y

$$\phi = k[A]_0^{n-1} t \quad (2.2)$$

Para orden "n", diferente de uno, se obtiene la ecuación 2.3

$$\phi = \frac{X_A^{1-n} - 1}{n - 1} \quad (2.3)$$

Para orden igual a uno se utiliza la ecuación 2.4

$$\ln X_A = -\phi \quad (2.4)$$

Las ecuaciones (2.3) y (2.4) se utilizan para calcular ϕ suponiendo valores de α entre 0 y 1, para diferentes órdenes. Posteriormente se traza el gráfico ϕ vs $\ln X_A$ en función del logaritmo natural de X_A para diferentes órdenes (Figura 2.1). Adicionalmente se determina α a partir de los datos experimentales y se traza un gráfico de α vs $\ln t$, en la misma escala que la grafica de Powell y se obtiene el orden por comparación con las curvas genéricas.

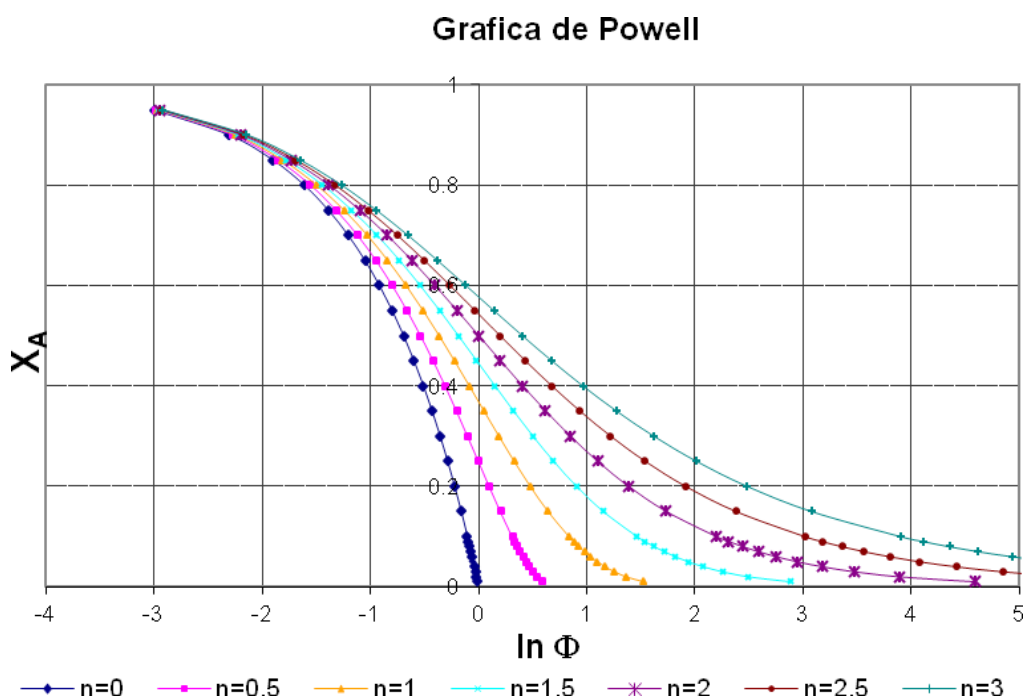


Figura 2.1 Curvas genéricas de Powell para orden 0, ½, 1, 1,5, 2, 2,5 y 3

El método de determinación de constantes consiste en obtener el valor de la constante de rapidez a diferentes tiempos, para varios órdenes de reacción, con las ecuaciones indicadas en la tabla 2.1. Posteriormente, realizar un análisis de los valores de las constantes determinada, sacar un promedio y aquellas que presenten menor desviación del promedio, corresponderá a orden de reacción.

Tabla 2.1 Ecuaciones de rapidez para el método de determinación de constantes

ORDEN	REACCIÓN	LEY DE RAPIDEZ	CONSTANTES DE RAPIDEZ
0	$A \rightarrow P$	$\frac{dx}{dt} = k$	$k = \frac{x}{t}$
1	$A \rightarrow \text{---}P$	$\frac{dx}{dt} = k[A]$	$k = \frac{1}{t} \ln \left[\frac{A_0}{(A_0 - x)} \right]$
2	$A \rightarrow \text{---}P$	$\frac{dx}{dt} = k[A]^2$	$k = \frac{x}{A_0(A_0 - x)}$

OBJETIVOS ACADÉMICOS

- Estudiar el funcionamiento de las “reacciones reloj” de yodo con persulfato
- Analizar los parámetros termodinámicos y cinéticos que rigen una reacción química.
- Determinar el grado de avance de reacción por medio de una valoración *in situ*
- Utilizar el método integral de determinación de constantes y el método de Powell

OBJETIVOS DE LA QUÍMICA VERDE

- Minimización de residuos (1). Factor de eficiencia en volumen 0.010
- Economía atómica alta (2), 100%
- Residuos con toxicidad reducida (4)
- Disminución del consumo energético (6)
- No fue necesaria la formación de derivados(8)
- No aplica el uso de catalizadores (9)
- Monitoreo en tiempo real del proceso (11)
- Minimización del riesgo potencial de accidentes químicos (12)

PROBLEMA INTEGRADOR

Determinar el orden parcial del persulfato.

ACTIVIDADES PREVIAS AL EXPERIMENTO

Determinar en una hoja de cálculo el $\ln \phi$ para orden igual a 0, ½, 1, 1,5, 2, 2,5 y 3. Trazar el gráfico de X_A vs $\ln \phi$.

Investigar ¿Qué es una “reacción reloj”.

Averiguar ¿Cuál es la diferencia entre yodometría y yodimetría?

Investigar cómo se determina la espontaneidad termodinámica en una escala de potenciales de oxidoreducción?

Indagar cuáles son los valores de los potenciales redox de los iones persulfato, tiosulfato y yoduro?

Averiguar por qué se observa un color azul entre el yodo y el almidón?

Revisar en las hojas de seguridad las propiedades químicas, físicas y toxicológicas de reactantes y productos.

Elaborar un diagrama de flujo ecológico que incluya el tratamiento y disposición de los residuos.

Comparar el protocolo presentado en Urquiza (1989) para este experimento y compararlo con el protocolo descrito en esta actividad experimental.

Analizar cada principio de la química verde para este experimento y compararlo con los resultados sugeridos en los objetivos de la química verde.

Utilizar las cartas de color en el diagrama de flujo, de acuerdo a la metodología descrita en los apéndices

EQUIPO(S), REACTIVO(S), MATERIAL(ES)

EQUIPOS	REACTIVOS	MATERIALES.
Por equipo: 1 Parrilla con agitación magnética	Por equipo: 1.5 mL de disolución de yoduro de potasio 0.5 M 5 mL de solución de persulfato de potasio 0.05 M 1.5 mL de tiosulfato de sodio 0.1 M 1 mL de sulfato de sodio 0.1 M 1 mL disolución indicadora de almidón 1 Termóstato	Por equipo: 12 tubos de ensaye con gradilla 3 vasos de precipitados de 10 mL 1 pipeta volumétrica de 2 mL 1 pipeta volumétrica de 5 mL 2 pipetas graduadas de 5 mL 1 cronómetro 1 termómetro 5 barras magnéticas para tubo de ensaye 1 micropipeta 1 piseta

PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

1. Preparación de la disolución indicadora de almidón: Pese 2 g de almidón y mezcle en un mortero con un poco de agua hasta formar una pasta homogénea, diluya con 30 mL de agua y verter poco a poco en 200 mL de agua hirviendo; mantenga en ebullición por 3 ó 4 minutos y deje enfriar. Si queda algo de materia insoluble, deje sedimentar y decante la disolución, conserve en frascos de vidrio ámbar.

NOTA: En caso de formación de hongos (se observan manchas oscuras o una especie de nata), deseche el almidón, el cual es biodegradable.

2. Etiquete cinco tubos de ensaye y coloque una barra magnética (IA-VA). Sistema A.
3. Agregue a los tubos del sistema A: KI, $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$, Na_2SO_4 , y almidón, en las cantidades descritas en la **Tabla 2.2**.

Tabla 2.2. Volúmenes de KI, Na₂S₂O₃ y Na₂SO₄ y almidón

Sistema	KI (0.5 M)	Na ₂ S ₂ O ₃ (0.1 M)	Na ₂ SO ₄ (0.1 M)	Almidón (1%)
1	0.3	0.1	0.4	0.2
2	0.3	0.2	0.3	0.2
3	0.3	0.3	0.2	0.2
4	0.3	0.4	0.1	0.2
5	0.3	0.5	0	0.2

- Coloque los tubos del sistema A en un termostato a temperatura ambiente, sobre la parrilla de agitación.
- Sistema B. Etiquete 5 tubos de ensaye como sistema B (IB-VB)
- Agregue a cada tubo del sistema B, 1 mL de la disolución de persulfato de potasio y coloque los tubos en el termóstato, junto a los del sistema A.
- Adicione rápidamente la solución del persulfato del tubo IB al tubo IA, accionando inmediatamente el cronómetro, agite magnéticamente. No detenga el cronómetro
- A los 60, 120, 180 y 240 segundos repita los puntos 7 y 8 con los tubos IIA-IIB, IIIA-IIIB, IVA-IVB y VA-VB respectivamente.
- Tome la lectura de tiempo al cual se presenta el color azul, en cada sistema. No detenga el cronómetro hasta el cambio de coloración del sistema 5.



Figura 2.2 Color azul observado en la actividad experimental de cinética de la “reacción reloj” de persulfato con yoduro

TABLA DE RESULTADOS

Tabla 2.3. Tiempos en que aparece el color

Reacción	Tiempo
I	
II	
III	
IV	
V	

ORIENTACIONES PARA TRATAMIENTO Y DISPOSICIÓN DE RESIDUOS

Deposite los residuos en un frasco etiquetado: Residuos de la reacción entre iones persulfato y yoduro.

NOTA: se generan 10 mL de residuos por equipo.

INSTRUCCIONES PARA LA ELABORACIÓN DEL REPORTE

- Trace la escala termodinámica de potenciales para las especies en la mezcla de reacción. Proponga las reacciones termodinámicamente permitidas.
- Explique por qué no se lleva a cabo entonces la reacción termodinámicamente más favorecida.
- Proponga las reacciones que expliquen la aparición del color azul a tiempos diferentes
- Realice la tabla de cantidades molares a tiempo 0, tiempo t, para las reacciones que se llevan a cabo.
- Calcule las concentraciones iniciales de persulfato de potasio, yoduro de potasio, tiosulfato de sodio y sulfato de sodio en cada sistema

Tabla 2.4 Concentraciones iniciales del sistema de reacción

Sistema	KI	Na ₂ S ₂ O ₃	Na ₂ SO ₄	K ₂ S ₂ O ₈
I				
II				
III				
IV				
V				

- Calcule las concentraciones que han reaccionado, cuando apareció el color azul y las constantes de rapidez a cada tiempo para orden cero, uno y dos, determine el orden de reacción.

Tabla 2.5 Cálculo de constantes de reacción

Sistema	tiempo	x	Orden cero $k = \frac{x}{t}$	Orden uno $k = \frac{1}{t} \ln \left[\frac{A_0}{(A_0 - x)} \right]$	Orden dos $k = \frac{x}{A_0(A_0 - x)}$
I					
II					
III					
IV					
V					

7. Calcule la fracción que ha reaccionado de persulfato y determine el orden de reacción por el método de Powell

Tabla 2.6 Datos para método de Powell

Sistema	tiempo (seg)	$X_A = \frac{(A_o - x)}{A_o}$	Ln t
I			
II			
III			
IV			
V			

8. Determine la fuerza iónica de cada uno de los sistemas.

Tabla 2.7 Fuerza iónica de los sistemas

Sistema	KI	Na ₂ S ₂ O ₃	Na ₂ SO ₄	K ₂ S ₂ O ₈	μ
I					
II					
III					
IV					
V					

9. ¿Encontró valores diferentes en la fuerza iónica?, Si su respuesta es afirmativa, cómo afecta la variación de la fuerza iónica en la rapidez de la reacción.
10. Sugerir un método para el tratamiento de los residuos.
11. Discuta sus resultados y concluya

ACTIVIDADES COMPLEMENTARIAS

1. ¿Qué diferencia existe entre el tipo de “reacciones reloj” y las denominadas “reacciones oscilantes”.
2. Investiga un ejemplo de reacciones oscilantes.

BIBLIOGRAFÍA

- Avery, H. E., Shaw, D. J. (1981) Cálculos Superiores en Química Física, Editorial Reverté, Barcelona.
- Levit, B.P. (1979) Química Física Práctica de Finlay (Versión española por Dr. Salvador Senent). Novena edición, Valladolid: Editorial Reverté.
- Obaya, A., Vargas-Rodríguez, Y. M. (2011) La Enseñanza Experimental de la Química desde una Perspectiva Interdisciplinaria y Ecológica En Química Verde Experimental (27-34). México. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Orozco, D. F. (1987). Análisis Químico Cuantitativo. 17ª: Editorial Porrúa, México.
- Shakhashiri, B. Z. (1992) Chemical Demonstrations, A Handbook for teachers of Chemistry Vol 4; The University of Wisconsin Press: Madison, WI.
- Urquiza, M. (1989) Experimentos de Fisicoquímica. ITESM
- Vargas Rodríguez, M., Obaya, A. (2005). Cálculo de parámetros de rapidez en cinética química y enzimática. México: Universidad Nacional Autónoma de México.
- Vargas Rodríguez, M., Obaya, A. (2011). Un análisis termodinámico y cinético de la "reacción reloj" de yodo. Memoria del 46º Congreso Mexicano de Química y 30º Congreso Nacional de Educación Química. Querétaro, Querétaro. 10-14 septiembre de 2011.

HOJA DE RESULTADOS PARA EL PROFESOR**ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No. 2**
CINÉTICA DE LA “REACCIÓN RELOJ” DE YODO CON PERSULFATO

Integrantes del quipo:

1. _____
2. _____
3. _____
4. _____

Profesor _____

Carrera _____

Grupo _____

Semestre _____

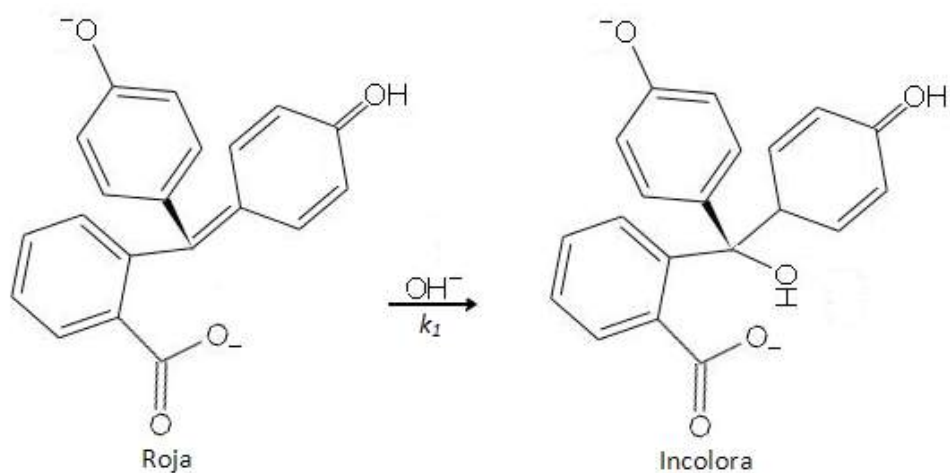
Fecha _____

Tabla 2.3. Tiempos en que aparece el color azul

Reacción	Tiempo
I	
II	
III	
IV	
V	

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No. 3

CINÉTICA DE REACCIÓN ENTRE FENOLFTALEÍNA E HIDRÓXIDO DE SODIO



Esquema 3.1 Reacción de fenolftaleína con hidróxido de sodio

INTRODUCCIÓN

La fenolftaleína es un indicador que a pH básico se decolora con una rapidez fácilmente medible. La fenolftaleína presenta un máximo de absorbancia a 470 nm, por lo tanto el avance de la reacción se determina tomando la lectura de absorbancia en función del tiempo, asumiendo que se está trabajando en concentraciones tan diluidas que se sigue la ley de Beer-Lambert. Este método tiene la ventaja de ser directo y rápido.

En este experimento se estudia la reacción entre Fenolftaleína (F) e hidróxido de sodio (Esquema 3.1). La fenolftaleína a $\text{pH} < 0$, es color naranja, entre 0-8.2 se encuentra en forma de lactona y es incolora, entre 8.2-12 se forma una fenolftaleína monosódica (FNa) de color rosa, a pH mayores de 12 reacciona con otra molécula de hidróxido de sodio para formar una fenolftaleína disódica (FNa_2) con una coloración roja, la cual reacciona lentamente con otra molécula de hidróxido de sodio para formar una fenolftaleína trisódica (FNa_3) incolora (Esquema 3.2).

El tiempo de vida media de una reacción se define como el tiempo en que reacciona la mitad de la concentración inicial, este método consiste en trazar gráficos del reactante que se está consumiendo en función del tiempo y a partir de este, determinar graficamen e el tiempo de vida media, a diversas concentraciones. Posteriormente, comparar los resultados con la tabla 3.2 y/o utilizar las ecuaciones para orden "n".

Tabla 3.1 Características de las especies estables de la fenolftaleína

pH	<0	0-8.2	8.2-9.7	>12
Especie	Carbocatión Trifenilmetano	Lactona	Fenolftaleína sódica	Fenolftaleína disódica-trisódica
Condiciones	Fuertemente ácidas	Ácidas o neutras	Básicas	Fuertemente básicas
Color	Naranja	Incoloro	Rosa-Rojo	Rojo-Incoloro
				

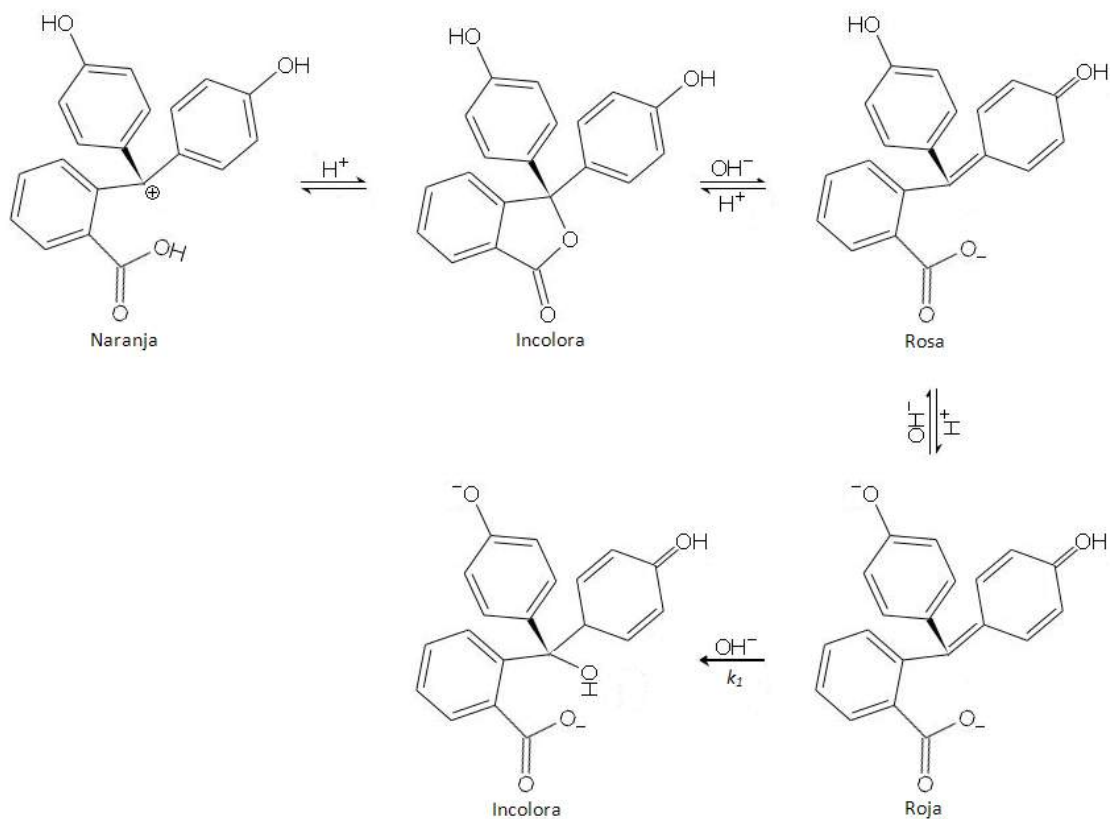
**Esquema 3.2. Mecanismo de reacción de fenolftaleína en función de pH**

Tabla 3.2 Ecuaciones para tiempo de vida media y fraccional

Tiempo de vida parcial	Orden de reacción				
	0	1	2	3	n
$t_{1/4}$	$\frac{1}{k} \ln\left(\frac{4}{3}\right)$	$\frac{1}{k} \ln\left(\frac{4}{3}\right)$	$\frac{1}{3kA_0}$	$\frac{7}{18kA_0^2}$	$\frac{(4/3)^{n-1} - 1}{k(n-1)A_0^{n-1}}$
$t_{1/3}$	$\frac{1}{k} \ln\left(\frac{4}{3}\right)$	$\frac{1}{k} \ln\left(\frac{3}{2}\right)$	$\frac{1}{2kA_0}$	$\frac{5}{8kA_0^2}$	$\frac{(3/2)^{n-1} - 1}{k(n-1)A_0^{n-1}}$
$t_{1/2}$	$\frac{1}{k} \ln\left(\frac{4}{3}\right)$	$\frac{1}{k} \ln(2)$	$\frac{1}{kA_0}$	$\frac{3}{2kA_0^2}$	$\frac{(2)^{n-1} - 1}{k(n-1)A_0^{n-1}}$
$t_{3/4}$	$\frac{1}{k} \ln\left(\frac{4}{3}\right)$	$\frac{1}{k} \ln(4)$	$\frac{3}{kA_0}$	$\frac{15}{kA_0^2}$	$\frac{(4)^{n-1} - 1}{k(n-1)A_0^{n-1}}$

OBJETIVOS ACADÉMICOS

- Estudiar la cinética de la decoloración de la fenolftaleína
- Determinar el grado de avance de reacción por medición espectrofotométrica
- Establecer el orden de reacción respecto a la fenolftaleína a partir de tiempo de vida media.
- Calcular el orden de reacción respecto a la fenolftaleína utilizando directamente la absorbancia.
- Determinar el orden de reacción respecto al hidróxido de sodio a partir de la constante de rapidez específica de pseudo o den

OBJETIVOS DE LA QUÍMICA VERDE

- Minimización y reutilización de residuos, Ev= 0.016 (1)
- Economía atómica alta, 100% (2)
- Utiliza y genera sustancias con el mínimo de toxicidad (3)
- Experimento eficaz, no tóxico (4)
- Eliminación de sustancias auxiliares(5)
- Minimización del consumo energético (6)
- No fue necesario la formación de derivados (8)
- No aplica el uso de catalizadores (9)
- Monitoreo en tiempo real del proceso (11)
- Minimizar el riesgo potencial de accidentes químicos (12)

PROBLEMA INTEGRADOR

Obtener el orden parcial de cada uno de los reactantes en la reacción de decoloración de fenolftaleína.

ACTIVIDADES PREVIAS AL EXPERIMENTO

Investigar el fundamento de cambio de color en los indicadores ácido base

Averiguar la relación entre el tiempo de vida media y orden de reacción.

Revisar en las hojas de seguridad las propiedades químicas, físicas y toxicológicas de reactantes y productos.

Elaborar un diagrama de flujo ecológico que incluya el tratamiento y disposición de los residuos.

Analizar cada principio de la química verde para este experimento y comparar con los resultados sugeridos en los objetivos de la química verde.

Utilizar las cartas de color en el diagrama de flujo, de acuerdo a la metodología descrita en los apéndices

EQUIPOS, REACTIVOS Y MATERIAL (ES)

MATERIAL	EQUIPO	REACTIVOS
Por equipo: 4 Vasos de precipitados de 10 mL 2 Pipetas volumétrica de 5 mL Micropipeta 50 μ L	Por equipo: 1 Parrilla con agitación magnética Espectrofotómetro VIS con dos celdas	Por equipo: 13 mL de disolución de NaOH 1 M 3 mL disolución de NaCl 1 M 0.2 mL de disolución alcohólica de fenolftaleína al 2%

DESARROLLO EXPERIMENTAL

1. Etiquete cuatro vasos de precipitados de 10 mL como I-IV, agregar a cada uno de ellos los volúmenes de hidróxido de sodio y cloruro de sodio indicadas en la Tabla 3.3

Tabla 3.3 Volúmenes presentes en el sistema A

Sistema	NaOH (1 M) mL	NaCl (1M) mL
I	4	0
II	3.5	0.5
III	3.0	1.0
IV	2.5	1.5

2. Coloque al sistema I, una barra de agitación magnética y agitar, adicione rápidamente a la mezcla del sistema I, 0.05 mL de fenolftaleína (la reacción inicia en cuanto se hace la mezcla, por tanto accionar el cronómetro), agite dos segundos y vacíe en la celda del espectrofotómetro.

3. Mida las absorbancias de la reacción a 460 nm cada 10 s durante 300 s, a partir de 10 segundos

4. Tome la lectura de temperatura de la mezcla de reacción.

5. Repita el procedimiento para los sistemas II, III y IV.

TABLAS DE RESULTADOS

T = _____ °C

Anote las Absorbancias medidas a cada tiempo de reacción, en la tabla 3.4

Tabla 3.4 Medidas de absorbancia

Tiempo (s)	I	II	III	IV
30				
40				
50				
60				
70				
80				
90				
100				
110				
120				
130				
140				
150				
160				
170				
180				
190				
200				
210				
220				
230				
240				

TRATAMIENTO Y DISPOSICIÓN DE RESIDUOS

Utilice los residuos para neutralizar residuos ácidos o guarde cada sistema por separado y reutilice al menos 10 veces, mida el pH cada vez que se reutilicen las disoluciones para determinar la concentración exacta de cada una de las disoluciones.

INSTRUCCIONES PARA LA ELABORACIÓN DEL REPORTE

1. Plantee la ecuación cinética de reacción.
2. Trace los gráficos de absorbancia en función del tiempo de preferencia en una hoja de cálculo, agregue una línea de tendencia polinomial, de ordenación lo más baja posible, para obtener una ecuación con una r^2 lo más cercana al valor de uno. A partir de la ecuación polinomial determine la absorbancia a tiempo cero.
3. Ajuste los gráficos con el dato de absorbancia cero, obtenida en el punto anterior.
4. Para el sistema I, mida directamente en el gráfico de absorbancia vs tiempo, el tiempo de vida media a partir de Absorbancia cero. Mida nuevamente el tiempo de vida media a partir de un medio de la absorbancia cero.
5. Con base al resultado anterior, de qué orden, es la reacción de decoloración de fenolftaleína?
6. Calcule las constantes de pseudo orden de reacción para cada sistema.
7. A partir de las constantes de pseudo orden determine el orden respecto al hidróxido de sodio y la constante de rapidez específica
8. Trace los gráficos de Absorbancia versus tiempo, $\ln$ Absorbancia versus tiempo y $1/A$ versus tiempo y concluya acerca del orden de reacción.
9. Calcular la fuerza iónica de cada uno de los sistemas. ¿Todos los sistemas tienen la misma fuerza iónica? Si no es así, cómo diseñaría el experimento para que todos los sistemas tengan la misma la fuerza iónica?
10. Discuta sus resultados y concluya.

ACTIVIDADES COMPLEMENTARIAS

1. *En el espectro visible ¿qué longitud de onda le corresponde aproximadamente a cada color?*
2. *¿Cuáles son los colores complementarios?*
3. *Explica la ley de Beer-Lambert para la absorción de la energía*
4. *Representa en una sola gráfica de absorbancia contra concentración*
 - a) *El comportamiento de un sistema que sigue la ley de Beer-Lambert*
 - b) *El comportamiento de un sistema que sufre desviación positiva*
 - c) *El comportamiento de un sistema que se desvía en forma negativa*
5. *¿Qué precauciones generales experimentales en cuanto a determinar el tiempo t y el control de temperatura deben considerarse al estudiar la cinética de una reacción química?*
6. *Investigue para que se utiliza la prueba de fenolftaleína en estructuras de concreto. Discuta su investigación con los resultados de este experimento.*

BIBLIOGRAFÍA

- Nicholson, L. (1989) Kinetics of the fading of phenolphthalein in alkaline solution. *J. Chem. Educ.*, 66 (2) 725-726.
- Obaya, A, Vargas, G. I., Vargas-Rodríguez, Y. M. (2012) Polinomial regression competition essential for the treatment of kinetic data (*en proceso de escritura*).
- Obaya, A., Vargas-Rodríguez, Y. M. (2011) La Enseñanza Experimental de la Química desde una Perspectiva Interdisciplinaria y Ecológica En Química Verde Experimental (27-34). México. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Vargas, M. & Obaya A. (2005). *Cálculo de parámetros de rapidez en cinética química y enzimática*. México: Universidad Nacional Autónoma de México.

HOJA DE RESULTADOS PARA EL PROFESOR

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No. 3

CINÉTICA DE REACCIÓN ENTRE FENOLFTALEÍNA E HIDRÓXIDO DE SODIO

Integrantes del quipo:

1. _____

2. _____

3. _____

4. _____

Profesor: _____

Carrera _____

Grupo _____

Semestre _____

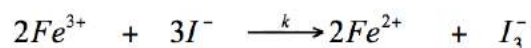
Fecha _____

Tabla 3.4 Medidas de absorbancia

Tiempo (s)	I	II	III	IV
30				
40				
50				
60				
70				
80				
90				
100				
110				
120				
130				
140				
150				
160				
170				
180				
190				
200				
210				
220				
230				
240				

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No. 4

CINÉTICA DE REACCIÓN ENTRE LOS IONES FÉRRICO Y IONES YODURO



Esquema 4.1.- Reacción entre iones: férrico y yoduro

INTRODUCCIÓN

Los iones de hierro(III), reaccionan fácilmente con el yoduro para formar iones de hierro(II) y triyoduro, por lo tanto el avance de la reacción puede seguirse mediante medidas de absorbancia de los iones triyoduro a la longitud de onda de 485 nm. Para determinar el orden de reacción parcial en una reacción en donde participan dos o más reactantes, lo más adecuado es utilizar un método diferencial, como el de rapidez inicial.

OBJETIVOS ACADÉMICOS

- Investigar la cinética de reacción entre los iones: férrico y yoduro.
- Aplicar la metodología experimental para determinar órdenes de reacción por métodos diferenciales.
- Seguir el avance de reacción por espectrofotometría

OBJETIVOS DE LA QUÍMICA VERDE

- Minimización y reutilización de residuos, Ev= 0.016 (1)
- Economía atómica alta, 100% (2)
- Utiliza y genera sustancias con el mínimo de toxicidad (3)
- Experimento eficaz, no tóxico (4)
- Eliminación de sustancias auxiliares(5)
- Minimización del consumo energético (6)
- No fue necesario la formación de derivados (8)
- No aplica el uso de catalizadores (9)
- Monitoreo en tiempo real del proceso (11)
- Minimizar el riesgo potencial de accidentes químicos (12)

PROBLEMA INTEGRADOR

Obtener el orden global de la reacción de persulfato con yoduro

ACTIVIDADES PREVIAS AL EXPERIMENTO

Investigar el método diferencial de rapidez inicial, para determinar el orden de reacción parcial para cada uno de los reactantes.

Averiguar la solubilidad de iones hierro en medio acuoso.

Consultar en la bibliografía los valores de los potenciales redox de Fe^{3+} y yoduro.

Indagar la solubilidad de yodo.

Investigar el valor de la constante de equilibrio de yodo-triyoduro,

Buscar en las hojas de seguridad las propiedades químicas, físicas y toxicológicas de reactantes y productos.

Elaborar un diagrama de flujo ecológico que incluya el tratamiento y disposición de los residuos.

Revisar el protocolo descrito en el Manual de experimentos de fisicoquímica V (Vargas y Co., 2007) y comparar con el protocolo actual.

Analizar cada principio de la química verde para este experimento y comparar con los resultados sugeridos en los objetivos de la química verde.

Utilizar las cartas de color en el diagrama de flujo, de acuerdo a la metodología descrita en los apéndices.

EQUIPO(S), REACTIVO(S), Y MATERIALE(S)

EQUIPOS	REACTIVOS	MATERIALES.
Por equipo: 1 Espectrofotómetro 1 Parrilla con agitación magnética	Por equipo: 9.5 mL de solución de nitrato férrico 0.05 M/en ácido nítrico 0.0625 M 12.5 mL de solución de KNO_3 0.1 M/ácido nítrico 0.0625 M 9.5 mL de solución de yoduro de potasio 0.05 M 13 mL de solución de KNO_3 (0.3)	Por equipo: Por equipo: 18 vasos de precipitados de 10 mL 2 pipetas graduadas de 1 mL 2 pipetas graduadas de 2 mL 1 pipeta graduada de 5 mL 1 cronómetro

DESARROLLO EXPERIMENTAL

1. Prepare las siguientes mezclas en los vasos de precipitados etiquetados como sistema IA-IXA.

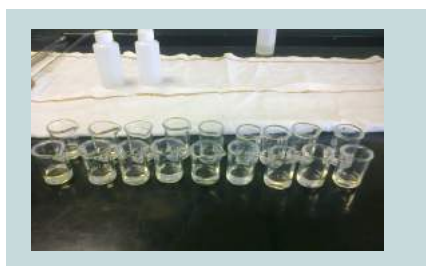
Tabla 4.1 Sistema A

Sistema	$\text{Fe}(\text{NO}_3)_3/\text{HNO}_3$ (0.05M/0.0625) (mL)	$\text{KNO}_3/\text{HNO}_3$ (0.1M/0.0625 M) (mL)
IA	2.5	0
IIA	2	0.5
IIIA	1.5	1
IVA	1	1.5
VA	0.5	2
VIA	0.5	2
VIIA	0.5	2
VIIIA	0.5	2
IXA	0.5	2

2. Prepare las siguientes mezclas en los vasos de precipitados etiquetados como sistema IB-IXB.

Tabla 4.2 Sistema B

Sistema B	KI (0.05 M) mL	KNO ₃ (0.3 M) mL
I B	0.5	2
II B	0.5	2
III B	0.5	2
IVB	0.5	2
VB	0.5	2
VIB	1.0	1.5
VII B	1.5	1
VIII B	2.0	0.5
IXB	2.5	0



3. Vierta rápidamente el contenido del sistema IB en el sistema IA, accionando inmediatamente el cronómetro, agite con agitador magnético durante 5 s, vaciar rápidamente en una celda de espectrofotómetro, y tomar lectura cada 10 s durante 120 segundos (Sistema I).



Figura 4.1. Montaje experimental de la reacción entre los iones férrico y yoduro

4. Repita el procedimiento del punto número 3 con los otros sistemas.

TABLA DE RESULTADOS

Anote los valores de absorbancia medidos para cada sistema.

Tabla 4.3 Resultados de absorbancia de los sistemas I-IX

Tiempo (s)	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX
10									
20									
30									
40									
50									
60									
70									
80									
90									
100									
110									
120									

INSTRUCCIONES PARA LA ELABORACIÓN DEL REPORTE

1. Determine las concentraciones iniciales, pH y la fuerza iónica de cada experimento.

Sistema	$\text{Fe}^{3+}(\text{M})$	$\text{I}^{-}(\text{M})$	H^{+}	NO_3	K^{+}	pH	Fuerza iónica
I							
II							
III							
IV							
V							
VI							
VII							
VIII							
IX							

2. Plantee la reacción que se lleva a cabo y construir la tabla de cantidades molares de la reacción (concentraciones iniciales, concentraciones que reaccionan a tiempo t y concentraciones de productos y reactantes que se forma o quedan a tiempo t).
3. Explique las funciones del ácido nítrico y del nitrato de potasio en la mezcla de reacción. ¿Cómo pueden afectar sus concentraciones en la rapidez de reacción?
4. Trace un gráfico de Absorbancia vs tiempo para cada experimento.
5. Determine el valor de rapidez inicial (r_0) para cada sistema. NOTA (Solo considerar los datos en que la absorbancia es linealmente proporcional al tiempo)

Sistema	$[\text{Fe}^{3+}]_0 (\text{M})$	$[\text{I}^-]_0 (\text{M})$	r_0
I			
II			
III			
IV			
V			
VI			
VII			
VIII			
IX			

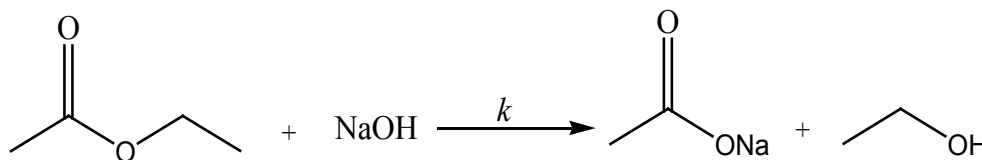
- Utilizando los valores de rapidez obtenidos y las concentraciones iniciales de yoduro de los sistemas 6-9, determine el orden respecto al yoduro.
- Utilizando los valores de rapidez inicial y las concentraciones iniciales de iones férricos de los sistemas 1-5, determine el orden respecto al hierro.
- A partir de los valores de rapidez de reacción y los órdenes calcular la constante de rapidez.
- Discuta sus resultados y concluya

BIBLIOGRAFÍA

- Obaya, A., Vargas-Rodríguez, Y. M. (2011) La Enseñanza Experimental de la Química desde una Perspectiva Interdisciplinaria y Ecológica En Química Verde Experimental (27-34). México. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Vargas, M. & Obaya, A. (2005). Cálculo de parámetros de rapidez en cinética química y enzimática. México: Universidad Nacional Autónoma de México
- Vargas-Rodríguez, Y.M., Obaya, A., Vargas, G. I, Rodríguez Pozos (2007). Manual de Experimentos de Fisicoquímica V. FES-Cuautitlán UNAM
- Vargas, M & Obaya, A. (2011). Cinética Química y Catálisis Verde. En Química Verde Experimental (pp. 189-215). México: Universidad Nacional Autónoma de México.

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No. 5

EFFECTO DE LA TEMPERATURA EN LA RAPIDEZ DE UNA REACCIÓN



Esquema 5.1.- Reacción entre acetato de etilo e hidróxido de sodio.

INTRODUCCIÓN

Arrhenius observó que la mayoría de las reacciones incrementaban su rapidez (constante de rapidez) con el incremento de la temperatura y obtuvo de forma empírica una ecuación que se ajustaba a los datos experimentales. Al respecto la forma matemática de representarla es a través de la llamada ley de Arrhenius.

$$k = Ae^{-E_a/RT} \quad (5.1)$$

En donde:

k = Constante de rapidez de reacción.

A = Factor pre-exponencial o de frecuencia, tiene las mismas unidades que la constante de rapidez de reacción.

E_a = Energía de activación, que generalmente viene dado en cal/mol.

R = Constante universal de los gases.

T = Temperatura absoluta.

Para explicar la rapidez de reacción, existen principalmente dos teorías que describen los cambios de rapidez en una reacción con respecto a la temperatura; la primera es la teoría de colisión y la segunda es la teoría del estado de transición o de la rapidez absoluta, mediante la cual se pueden determinar los parámetros de activación: energía interna ($\Delta U^\ddagger$), entalpía ($\Delta H^\ddagger$), entropía ($\Delta S^\ddagger$) y energía de Gibbs de activación ($\Delta G^\ddagger$). La teoría de la rapidez absoluta desarrollada por Eyring, llegando a una ecuación del mismo nombre (ecuación 5.2)

$$k = \frac{KT}{h} e^{\Delta S^\ddagger/R} e^m e^{-E_a/RT} \quad (5.2)$$

En donde:

k = Constante de rapidez de reacción.

h = constante de Planck (1.583×10^{-34} cal s)

K = constante de Boltzmann (3.3×10^{-24} cal/K)

$\Delta S^\ddagger$ = Entropía de activación

R = Constante universal de los gases

m = molecularidad

E_a = Energía de activación, que generalmente viene dado en cal/mol.

T = Temperatura absoluta.

OBJETIVOS ACADÉMICOS

- Analizar experimentalmente el efecto de la temperatura sobre la rapidez de reacción.
- Estudiar las teorías que explican los cambios de rapidez de reacción en función de la temperatura
- Utilizar la ecuación de Arrhenius para determinar la energía de activación y el factor de frecuencia de una reacción química
- Determinar energía interna, entalpía, entropía y energía de Gibbs de activación ($\Delta U^\ddagger$, $\Delta H^\ddagger$, $\Delta S^\ddagger$ y $\Delta G^\ddagger$) de la hidrólisis de acetato de etilo por hidróxido de sodio.

OBJETIVOS DEL ENFOQUE DE LA QUÍMICA VERDE

- Minimización de residuos (1). Factor de eficiencia en volumen 0.010
- Economía atómica alta (2), 100%
- Experimento con sustancias de toxicidad reducida (3)
- Residuos con toxicidad reducida (4)
- Eliminación de sustancias auxiliares (5)
- Se disminuyó el consumo energético (6)
- No fue necesaria la formación de grupos de bloqueo (8)
- Residuos biodegradables (10)
- Monitoreo en tiempo real del proceso (11)
- Minimización del riesgo potencial de accidentes químicos (12)

PROBLEMA INTEGRADOR

Determinar los parámetros de activación de la reacción de persulfato con yoduro

ACTIVIDADES PREVIAS AL EXPERIMENTO

Investigar los factores que pueden afectar la rapidez de una reacción,

Averiguar la forma de los diagramas de energía en función de coordenada de reacción,

Indagar los fundamentos de las teorías de colisiones y de rapidez absoluta.

Buscar en las hojas de seguridad las propiedades químicas, físicas y toxicológicas de reactantes y productos.

Elaborar un diagrama de flujo ecológico que incluya el tratamiento y disposición de los residuos, con pictogramas y rombos de seguridad

Analizar cada principio de la química verde para este experimento y comparar con los resultados sugeridos en los objetivos de la química verde.

Utilizar las cartas de color en el diagrama de flujo, de acuerdo a la metodología descrita en los apéndices.

EQUIPO(S), REACTIVO(S), Y MATERIAL(ES)

MATERIAL	EQUIPO	REACTIVOS
Por equipo: 2 Tubo de ensaye de 150 mm por 15 mm 1 Soporte universal con pinzas 1 Cronómetro 2 Pipetas volumétricas de 5 mL 3 Vasos de precipitados de 10 mL 1 Piseta 1 Barra de agitación magnética 1 Vaso de precipitados de 50 mL 1 Termómetro	Por equipo: 1 pH-metro 1 Parrilla con agitación magnética 1 Baño termostatado	Por equipo: 10 mL de disolución 0.2 M de hidróxido de sodio 10 mL de disolución 0.2 M de acetato de etilo, recién preparada

DESARROLLO EXPERIMENTAL

1. En el tubo de ensayo perfectamente limpio y seco, colocar una barra de agitación magnética y adicionar 5 mL de disolución de NaOH 0.2 M. Introduzca el tubo en un termóstato a temperatura ambiente y fije el tubo al soporte universal (Figura 1.1).
2. Mida con pipeta volumétrica 5 mL de acetato de etilo y vacíe en un vaso de pp de 10 mL, agregue rápidamente la disolución medida de acetato de etilo al tubo de ensayo y poner en marcha el cronómetro en el momento en que ha sido agregada 2.5 mL. Inmediatamente introduzca el electrodo al tubo.
3. Haga medidas de pH para la reacción a los siguientes tiempos: 0.25, 0.5, 1, 1.5, 2, 3, 5, 7, 10, 12, 14, 16, 18 y 20 min.
4. Repita el procedimiento a una temperatura de 10° C por arriba de la temperatura ambiente, midiendo a los siguientes tiempos: 1/4, 1/2, 1, 1.5, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 y 10 min.



Figura 5.1.- Montaje experimental de la reacción de hidrólisis de acetato de etilo

ORIENTACIONES PARA EL TRATAMIENTO Y DISPOSICIÓN DE RESIDUOS

Guarde los residuos en frasco etiquetado, en la siguiente sesión la reacción se habrá llevado a cabo al 100%. Los residuos son biodegradables y no tóxicos. Depositelos en la tarja.

TABLAS DE RESULTADOS EXPERIMENTALES

1. Datos de pH en función del tiempo (Tabla 5.1).

Tabla 5.1 Valores de pH

TIEMPO (min.)	pH Temp 1_____°C	pH Temp 2_____°C
0.25		
0.5		
1		
1.5		
2		
3		
5		
7		
10		
12		
14		
16		
18		
20		

INSTRUCCIONES PARA LA ELABORACIÓN DEL REPORTE

1. Elabore un gráfico de pH en función del tiempo. Ajuste a una ecuación polinomial y determine pH a tiempo cero.
2. Plantee la ecuación cinética de la reacción.
3. Desarrolle la tabla de cantidades molares
4. Calcular el valor de la concentración de NaOH a los tiempos indicados en función del pH en la tabla de resultados, para las dos temperaturas (Tabla 5.2).

Tabla 5.2. Concentración de hidróxido de sodio a diversos tiempos

TIEMPO (min.)	[NaOH] Temperatura 1	TIEMPO (min.)	[NaOH] Temperatura 2
0.25		1/4	
0.5		1/2	
1		1	
1.5		1.5	
2		2	
3		3	
5		4	
7		5	
10		6	
12		7	
14		8	
16		9	
18		10	
20			

5. Con el orden de reacción obtenido en el experimento 3, calcule la constante de rapidez por el método integral gráfico, utilice los resultados de la tabla anterior.
6. Por medio de la ecuación de Arrhenius, calcule la energía de activación de la reacción y el factor de frecuencia.
7. Utilice la ecuación de Eyring, determinar los parámetros de activación: $\Delta U^\ddagger$, $\Delta H^\ddagger$, $\Delta S^\ddagger$ y $\Delta G^\ddagger$, para cada grado de temperatura, en el intervalo de estudio.
8. Tracee los gráficos de $\Delta U^\ddagger$, $\Delta H^\ddagger$, $\Delta S^\ddagger$ y $\Delta G^\ddagger$ en función de la temperatura.
9. Discuta sus resultados y concluya

ACTIVIDADES COMPLEMENTARIAS

1. La rapidez de una reacción bimolecular a 500 K es diez veces mayor que a 400 K. Calcular el valor de la energía de activación
2. Se ha encontrado experimentalmente que en 10 minutos se convierten producto el 75% de un líquido reactante, a una temperatura de 25 °C, con un orden de reacción igual a $\frac{1}{2}$. Determina el valor de la cantidad convertida en media hora. Si la temperatura se incrementa a 35 °C, cuál será el valor de dicha cantidad.

BIBLIOGRAFÍA

- Obaya, A., Vargas-Rodríguez, Y. M. (2011) La Enseñanza Experimental de la Química desde una Perspectiva Interdisciplinaria y Ecológica En Química Verde Experimental (27-34). México. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Smith, M. B. & March, J. (2007) March's Advanced organic chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure (6th Ed.). Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc.
- Vargas, M & Obaya, A. (2011). Cinética Química y Catálisis Verde. En Experimentos de Química Verde (pp. 189-215). México: Universidad Nacional Autónoma de México.
- Vargas, M. & Obaya, A. (2005). Cálculo de parámetros de rapidez en cinética química y enzimática. México: Universidad Nacional Autónoma de México
- Vargas-Rodríguez, Y. M., Obaya, A, Vargas, G. I. (2012) Regresión polinomial una competencia indispensable para el tratamiento de datos en cinética química. 4º Congreso Internacional Sobre la Enseñanza y Aplicación de las Matemáticas. FES C UNAM 2012.

HOJA DE RESULTADOS PARA EL PROFESOR

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No. 5

EFFECTO DE LA TEMPERATURA EN LA RAPIDEZ DE UNA REACCIÓN

Integrantes del quipo:

1. _____
2. _____
3. _____
4. _____

Profesor _____

Carrera _____

Grupo _____

Semestre _____

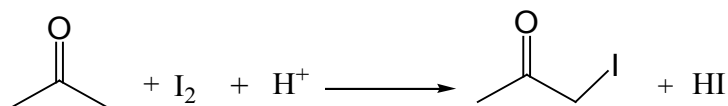
Fecha _____

Tabla 5.1 Valores de pH

TIEMPO (min.)	pH Temp 1 _____ °C	pH Temp 2 _____ °C
0.25		
0.5		
1		
1.5		
2		
3		
5		
7		
10		
12		
14		
16		
18		
20		

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No.6

YODACIÓN DE ACETONA



Esquema 6.1 Reacción de yodación de acetona en medio ácido

INTRODUCCIÓN

El incremento en la rapidez de una reacción química se logra por la adición de una sustancia denominada catalizador. El catalizador interacciona con los reactantes para formar un intermediario, que se regenera en etapas posteriores y al final de la reacción permanece químicamente inalterado. En función del estado físico del catalizador en la mezcla de reacción, la catálisis se clasifica en homogénea y heterogénea. Cuando el catalizador se encuentra en la misma fase que los reactantes se define como catálisis homogénea. Dentro de la catálisis homogénea se encuentra la catálisis ácido base.

La reacción de yodación de la acetona presenta una cinética lenta en condiciones normales pero la reacción se acelera considerablemente en condiciones de catálisis homogénea ácida o básica.

Dado que, en la halogenación α de cetonas catalizada por ácido cada paso sucesivo es más lento que el paso anterior y como en este protocolo está presente un exceso de acetona respecto al yodo, podemos suponer que la especie formada será exclusivamente α -monoyodocetona.

El avance de la reacción se seguirá a través de medidas de la absorbancia de la reacción a 460 nm, longitud de onda a la cual absorbe el yodo, asumiendo que se está trabajando en concentraciones tan diluidas que se sigue la ley de Beer-Lambert. El yodo es prácticamente insoluble en agua, por lo que se preparan soluciones de yodo/yoduro de potasio. Previamente se realizó una curva de calibración de soluciones yodo/yoduro (coeficiente de extinción molar de 99.2), para que se determine directamente la concentración a partir de las medidas de absorbancia.

OBJETIVOS ACADÉMICOS

- Estudiar la catálisis homogénea ácido-base
- Determinar el grado de avance de reacción por medición espectrofotométrica
- Aplicar el método de aislamiento de Ostwald
- Investigar cuál es la etapa lenta en el mecanismo de reacción de la yodación de acetona y cómo influye en el orden de reacción de cada uno de los reactantes.

OBJETIVOS DE LA QUÍMICA VERDE

- Minimización de residuos (1). $E_v = 0.020$
- Economía atómica alta (2), 100%
- Residuos con toxicidad reducida (4)
- Eliminación de sustancias auxiliares (5)
- Se disminuyó el consumo energético (6)
- No fue necesaria la formación de grupos de bloqueo (8)
- Uso de catalizadores (9)
- Monitoreo en tiempo real del proceso (11)
- Minimización del riesgo potencial de accidentes químicos (12)

PROBLEMA INTEGRADOR

Establecer los órdenes de reacción parcial de cada uno de los reactantes que participan en la yodación de la acetona.

ACTIVIDADES PREVIAS AL EXPERIMENTO

Investigar qué es catálisis ácido base específica y catálisis ácido base general.

Averiguar cómo se construye un ciclo catalítico?

Indagar qué tipo de gráficos se obtienen al graficar la constante de rapidez en función del pH.

Revisar el mecanismo de reacción de la halogenación de acetona en medio ácido y en medio básico.

Definir el desarrollo del método de aislamiento de Ostwald.

Revisar en las hojas de seguridad las propiedades químicas, físicas y toxicológicas de reactantes y productos.

Elaborar un diagrama de flujo ecológico que incluya el tratamiento y disposición de los residuos, con pictogramas y rombos de seguridad

Analizar cada principio de la química verde para este experimento y comparar con los resultados sugeridos en los objetivos de la química verde.

Utilizar las cartas de color en el diagrama de flujo, de acuerdo a la metodología descrita en los apéndices.

EQUIPO(S), REACTIVO(S), Y MATERIAL(ES)

EQUIPOS	REACTIVOS	MATERIALES.
Por equipo: 1 Parrilla con agitación magnética Espectrofotómetro VIS	Por equipo: 3.5 mL de disolución de yodo 0.002M* 2 mL acetona 2M 3.5 mL de ácido clorhídrico 2M 5 mL de agua destilada	Por equipo: 8 vasos de precipitado de 10 mL 4 pipetas graduada de 1 ml 8 barritas magnéticas 1 cronómetro 1 Píseta

*Para una concentración de 0.002M se pesan 0.0506g de I_2 y 0.1603g de KI aforándose a 100 mL.

DESARROLLO EXPERIMENTAL

1. Etiquete cinco vasos de precipitados de 10 mL como sistema IA-VA, agregue a cada uno de ellos los volúmenes de disoluciones de acetona, ácido clorhídrico y cloruro de sodio indicadas en la Tabla 6.1. Mezcle agitando con barra de agitación magnética, al menos 10 minutos.

Tabla 6.1 Volúmenes en mL presentes en el sistema A

Sistema A	Acetona (2 M)	HCl (1M)	NaCl (1 M)
IA	1.0	0.5	0.5
IIA	1.0	1.0	0.0
IIIA	0.5	1.0	0.5
IVA	0.5	1.0	0.5
VA	0.5	1.5	0

2. Etiquete cinco vasos de precipitados de 10 mL como sistema 1B-VB, agregar a cada uno de ellos los volúmenes de la disolución de yodo y agua indicados en la tabla 6.2

Tabla 6.2 Volúmenes en mL presentes en el sistema B

Sistema B	Yodo (0.002)	H ₂ O
IB	1.0	1.0
IIB	1.0	1.0
IIIB	1.0	1.0
IVB	0.5	1.5
VB	1.0	1.0



3. Agregue rápidamente la mezcla del sistema IB en la del sistema IA, (la reacción inicia en cuanto se hace la mezcla, por tanto accionar el cronómetro), agite con barra de agitación 2 segundos y vaciar en la celda del espectrofotómetro.
4. Mida las absorbancias de la reacción a 460 nm cada 30 s durante 5 min.
5. Tome la lectura de temperatura de la mezcla de reacción.
6. Repita el procedimiento para los sistemas II, III y IV.

TABLA DE RESULTADOS

Anote las Absorbancias medidas a cada tiempo de reacción. Temperatura _____ °C

Tabla 6.3 Resultados de absorbancia para los sistemas I-V

Tiempo (s)	I	II	III	IV	V
0					
30					
60					
90					
120					
150					
180					
210					
240					
270					
300					

ORIENTACIONES PARA EL TRATAMIENTO Y DISPOSICIÓN DE RESIDUOS

Neutralizar con el NaOH del experimento tres, hasta pH 7, guardar en frasco etiquetado.

INSTRUCCIONES PARA LA ELABORACIÓN DEL REPORTE

1. Plantee la ecuación cinética de la reacción de la yodación de acetona.
2. Calcule las concentraciones iniciales de cada componente en los sistemas I-IV.
3. Determine la fuerza iónica de cada una de las mezclas de reacción

Sistema	$[\text{CH}_3\text{COCH}_3]_0$	$[\text{HCl}]_0$	$[\text{I}_2]_0$	r_0	pH	Fuerza iónica
I						
II						
III						
IV						
V						

4. Elabore la tabla de cantidades molares y determine a partir de los valores de absorbancia la concentración a tiempo t.
5. Trace los gráficos de concentración en función de tiempo para cada sistema.
6. Determine la rapidez inicial de cada sistema.
7. Utilizando el método de aislamiento de Ostwald, determine el orden parcial de cada uno de los reactantes.
8. Con base en los resultados obtenidos en el punto anterior, proponga el mecanismo de reacción.
9. Calcule la constante de rapidez catalítica para cada sistema y trace un gráfico de constante catalítica versus pH. ¿Qué relación observa?
10. ¿Qué parámetros se deben modificar para incrementar la rapidez de la reacción?
11. ¿Cómo afectan la fuerza iónica en el experimento?
12. Concluya acerca del experimento

ACTIVIDADES COMPLEMENTARIAS

1. *Calcula la disminución de la energía de activación por un catalizador para triplicar la rapidez de reacción a 300 K.*
2. *Ejemplifica una reacción catalítica homogénea por medio de sales metálicas*
3. *Ejemplifica una reacción catalítica homogénea por medio de compuestos de coordinación*
4. *El análisis completo de una reacción catalítica abarca fundamentalmente tres campos: termodinámica, cinética y el mecanismo del proceso catalítico. Elabora un ensayo sobre su utilidad en el estudio de las reacciones elementales.*
5. *Investiga ejemplos de qué catalizadores se emplearían para reacciones de oxidación de hidrocarburos en fase líquida*
6. *En el proceso Oximare, reactantes que se emplean son hidrocarburo + propileno. Qué tipo de catalizador se emplea y qué tipos de productos se obtienen.*

BIBLIOGRAFÍA

- Birk, J. P & Walters, D. L. (1979) Three methods for studying the kinetics of the halogenation of acetone, J. Chem. Educ. 69, 585-587.
- Obaya, A., Vargas-Rodríguez, Y. M. (2011) La Enseñanza Experimental de la Química desde una Perspectiva Interdisciplinaria y Ecológica En Química Verde Experimental (27-34). México. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Smith, M. B. & March, J. (2007) March's Advanced organic chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure (6th Ed.). Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc.
- Vargas, M & Obaya, A. (2011). Cinética Química y Catálisis Verde. En Química Verde Experimental (pp. 189-215). México: Universidad Nacional Autónoma de México.
- Vargas, M. & Obaya, A. (2005). Cálculo de parámetros de rapidez en cinética química y enzimática. México: Universidad Nacional Autónoma de México

HOJA DE RESULTADOS PARA EL PROFESOR

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No.6 YODACIÓN DE ACETONA

Integrantes del quipo:

1. _____
2. _____
3. _____
4. _____

Profesor _____

Carrera _____

Grupo _____

Semestre _____

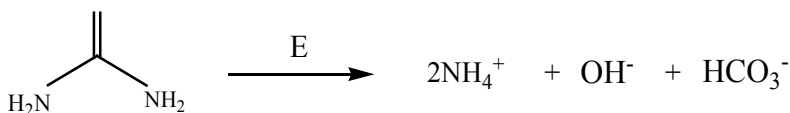
Fecha _____

Tabla 6.1 Resultados de absorbancia para los sistemas I-V

Tiempo (s)	I	II	III	IV	V
0					
30					
60					
90					
120					
150					
180					
210					
240					
270					
300					

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No. 7

DESCOMPOSICIÓN DE UREA POR UREASA



Esquema 7.1 Descomposición enzimática de urea por ureasa

FUNDAMENTO

La descomposición enzimática de la urea ocurre en la presencia de ureasa, la cual puede ser obtenida de diferentes semillas naturales tales como el frijol de soya, el garbanzo y las habas entre otros, en este experimento se seleccionó al frijol de soya para extraer la enzima ureasa. La urea en presencia de ureasa genera CO_2 y amoníaco, los cuales en solución acuosa forman iones de bicarbonato, de hidróxido y de amonio, por lo que el avance de la reacción puede seguirse fácilmente por medidas de conductividad (Esquema 7.1).

La mayoría de las reacciones incrementa su rapidez con el incremento de la temperatura, sin embargo, en las reacciones enzimáticas el fenómeno común de aumento en la rapidez de reacción ocurre sólo a bajas temperaturas, dada la mayor energía de las moléculas, se sobrepone a la desnaturalización de la enzima debido a su origen protéico. El resultado global de estas dos interacciones da como resultado un perfil con un máximo de rapidez a una temperatura dada, que se le denomina temperatura óptima. Como se representa en la figura 7.1.

Sin embargo, en el intervalo de temperaturas antes de la máxima actividad, las reacciones biocatalizadas, al igual que la mayoría de las reacciones químicas, ajustan su rapidez a la ecuación de Arrhenius (ecuación 7.1).

$$k = Ae^{-E_a/RT} \quad (7.1)$$

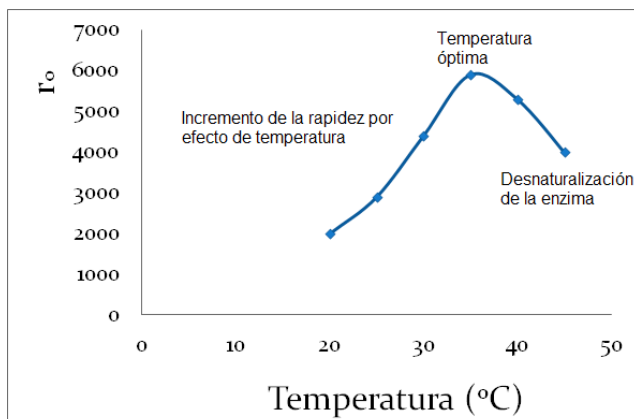
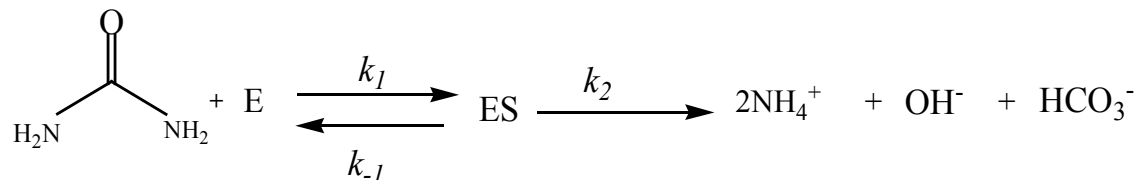


Figura 7.1 Rapidez de reacción de una catálisis enzimática en función de la temperatura

El mecanismo que sigue la cinética enzimática es el propuesto por Michaelis y Menten (Esquema 7.2).



La ecuación cinética a la cual se ajusta este modelo es el adaptado por Briggs y Haldane, considerando un estado estacionario para el complejo enzima-sustrato

$$r_o = \frac{r_{\text{máx}}[S]_o}{K_M + [S]_o} \quad (7.2)$$

en donde

K_M = constante de Michaelis

$$K_M = \frac{k_{-1} + k_2}{k}$$

En este protocolo, se realiza una serie de reacciones a diferentes temperaturas, manteniendo constante la concentración de urea y ureasa, para obtener la temperatura de máxima actividad del catalizador. Posteriormente variando las concentraciones de urea, y manteniendo constante la cantidad de catalizador (ureasa) y la temperatura óptima, se realiza el estudio cinético.

OBJETIVOS ACADÉMICOS

- Investigar la cinética de descomposición de urea por ureasa
- Utilizar a la enzima ureasa extraída de soya
- Estudiar el mecanismo de reacción para reacciones biocatalíticas
- Obtener los parámetros cinéticos: constante de Michaelis (K_m) y rapidez máxima ($r_{\text{máx}}$) mediante la ecuación de Lineweaver-Burk.
- Seguir el avance de reacción por medidas de conductividad
- Investigar el efecto de la temperatura sobre la rapidez de reacción en la catálisis enzimática.
- Obtener la temperatura de máxima actividad de un biocatalizador (ureasa)

- Determinar la energía de activación de una reacción.
- Calcular energía interna, entalpía, entropía y energía de Gibbs de activación ($\Delta U^\ddagger$, $\Delta H^\ddagger$, $\Delta S^\ddagger$ y $\Delta G^\ddagger$) de la hidrólisis biocatalítica de la urea.

OBJETIVOS DE LA QUÍMICA VERDE

- Minimización de residuos (1). Factor de eficiencia en volumen 0.100
- Economía atómica alta (2), 100%
- Experimento con sustancias de toxicidad reducida (3)
- Residuos con toxicidad reducida (4)
- Eliminación de sustancias auxiliares (5)
- Disminución del consumo energético (6)
- No fue necesaria la formación de grupos de bloqueo (8)
- Se utilizó la catálisis (9)
- Residuos biodegradables (10)
- Monitoreo en tiempo real del proceso (11)
- Minimización del riesgo potencial de accidentes químicos (12)

PROBLEMA INTEGRADOR

Determinar la K_M de la ureasa extraída de frijol de soya en la descomposición de la urea.

ACTIVIDADES PREVIAS AL EXPERIMENTO

Investigar los mecanismos de biocatálisis (modelo de Michaelis-Menten, ecuaciones de Lineweaver-Burk y Eadie Hoftee)

Revisar en las hojas de seguridad las propiedades químicas, físicas y toxicológicas de reactantes y productos.

Elaborar un diagrama de flujo ecológico que incluya el tratamiento y disposición de los residuos, con pictogramas y rombos de seguridad

Comparar el protocolo descrito de forma tradicional, en donde se utilizan soluciones amortiguadora y se valora el amoníaco con el protocolo descrito en este experimento.

Analizar cada principio de la química verde para este experimento y comparar con los resultados sugeridos en los objetivos de la química verde.

Utilizar las cartas de color en el diagrama de flujo, de acuerdo a la metodología descrita en los apéndices.

EQUIPO(S), REACTIVO(S), Y MATERIAL(ES)

MATERIAL	EQUIPO	REACTIVOS
Por equipo 5 Barras de agitación magnética 5 Tubos de ensaye de 20x200 mm 1 Vaso de precipitados de 100 mL 1 Pipeta volumétrica de 10 mL 2 Perillas 1 Soporte universal 1 Pinzas para matraz 1 Cronómetro 1 Micropipeta (0.5 mL) 1 Matraz volumétrico de 100 mL 4 matraces volumétricos de 25 mL 1 Vaso de precipitados de 600 mL	Por equipo: 1 Parilla de calentamiento con agitación magnética 1 Puente de conductividad digital con celda.	Por equipo: 15 mL de disoluciones stock de urea 0.05 M, para diluir a 25 mL a concentración: 0.004, 0.008, 0.012 y 0.016 M 100 mL de disolución de urea 0.02 M 1 g de frijol de soya
	Por grupo: 1 Centrifuga 1 Balanza analítica	

DESARROLLO EXPERIMENTAL

A. Extracción de ureasa de soya

1. Triture en un mortero 1.0 g de soya y agregar 20 mL de etanol/agua al 30% (v/v).
 2. Centrifugue a 2500 r.p.m. durante 15 min. Mezcle todos los sobrenadantes en un recipiente.
- NOTA: Se obtiene la cantidad de ureasa requerida por equipo.

B. Temperatura de actividad máxima de la ureasa

1. En el tubo de ensaye perfectamente limpio y seco, ponga una barra de agitación magnética y adicionar 20 mL de la disolución de urea 0.02 M. Coloque el tubo en un baño de temperatura contante (temperatura ambiente) y fije el tubo al soporte universal



Figura 7.2 Montaje experimental de experimento de la hidrólisis de urea

2. Mida la temperatura del baño, agregue con la jeringa sin aguja 0.5 mL del extracto de ureasa al tubo de ensayo y poner en marcha el cronómetro en el momento de mezclar. Inmediatamente introduzca la celda al tubo.
3. Haga medidas de conductividad para la reacción cada 10 segundos, por dos minutos.
4. Repetir el experimento a las temperaturas de 40, 50 y 60 °C, respectivamente.

C. Parámetros cinéticos

1. En el tubo de ensayo perfectamente limpio y seco, ponga una barra de agitación magnética y adicione 10 mL de la disolución de urea 0.004 M. Coloque el tubo en un baño de temperatura de máxima actividad y fijar el tubo al soporte universal (Figura 5)
2. Mida la temperatura del baño, agregue rápidamente, 0.5 mL del extracto de ureasa al tubo de ensayo y ponga en marcha el cronómetro en el momento de mezclar. Inmediatamente introduzca la celda al tubo.
3. Haga medidas de conductividad para la reacción cada 10 segundos, por dos minutos.
4. Repita los puntos 1,2 y 3 con las concentraciones 0.008, 0.012, 0.016 y 0.02 M.

TABLAS DE RESULTADOS

Anote los resultados de conductividad en función del tiempo a las temperaturas: ambiente, 40, 50 y 60 °C (Tabla 7.1).

7.1 Resultados de conductividad en función del tiempo

TIEMPO (s)	TEMPERATURA (°C)			
	Ambiente	40	50	60
10				
20				
30				
40				
50				
60				
70				
80				
90				
100				
110				
120				

Datos de conductividad en función del tiempo, a las concentraciones de las disoluciones de urea.
Tabla 7.2

Tabla 7.2 Resultados de conductividad. Temp_____ °C

TIEMPO (s)	CONDUCTIVIDAD				
	0.004 M	0.008 M	0.012 M	0.016 M	0.02 M
10					
20					
30					
40					
50					
60					
70					
80					
90					
100					
110					
120					

ORIENTACIONES PARA EL TRATAMIENTO Y DISPOSICIÓN DE RESIDUOS

Los residuos de este experimento son biodegradables y no tóxicos. Utilizarlos como abono.

INSTRUCCIONES PARA LA ELABORACIÓN DEL REPORTE

1. Elabore un gráfico de conductividad vs tiempo, para cada temperatura y determine la rapidez inicial (r_o), mediante regresión lineal.
NOTA: la rapidez inicial es la pendiente de cada gráfico .
2. Esboce el gráfico de r_o vs. Temperatura y evalúe la temperatura de máxima actividad biocatalítica.
3. Trace un gráfico de conductividad vs tiempo, para cada concentración y determine la rapidez inicial (r_o) respectiva.
4. Profile el gráfico de (r_o) vs $[S]_o$, con base en lo obtenido, en que región se encuentran sus resultados (cinética de orden uno, fraccionario o cero).
5. Mediante la ecuación de Lineweaver-Burck, determine rapidez máxima ($r_{máx}$) y la K_M .
6. Determine la constante de rapidez a cada temperatura experimental. No considere los resultados posteriores a la temperatura de máxima actividad catalítica.

NOTA: La ecuación de rapidez inicial tiene la forma:

$$r_o = \frac{k_{cat}[E]_o[S]_o}{K_M + [S]_o}$$

Si en las condiciones del experimento, la cinética sigue una ecuación de primer orden,

$$[S]_o < K_M$$

Por lo tanto, $[S]_o$ es despreciable frente a K_M .

$$r_o = \frac{k_{cat}[E]_o[S]_o}{K_M} = \frac{r_{máx}}{K_M} [S]_o = \frac{r_{máx}}{K_M} [S]_o = k[S]_o$$

En donde $k = r_{máx}/K_M$, en consecuencia se pueden determinar la constantes de rapidez, dividiendo $r_o/[S]_o$.

Pero, si en las condiciones del experimento, la cinética sigue una ecuación de orden cero,

$$[S]_o > K_M$$

Por lo tanto, K_M es despreciable frente a $[S]_o$ y la ecuación de rapidez inicial toma la forma

$$r_o = \frac{k_{cat}[E]_o[S]_o}{K_M + [S]_o}$$

Entonces la constante de rapidez es constante a todas las temperaturas e igual a la rapidez máxima.

$$r_o = \frac{k_{cat}[E]_o[S]_o}{[S]_o} = k_{cat}[E]_o = r_{máx} = k$$

7. Por medio de la ecuación de Arrhenius, calcule la energía de activación de la reacción y el factor de frecuencia.
8. Determine los parámetros de activación: $\Delta U^\ddagger$, $\Delta H^\ddagger$, $\Delta S^\ddagger$ y $\Delta G^\ddagger$. (Utilizar la ecuación de Eyring), a cada temperatura de experimentación.
9. Compare sus resultados con los reportados en la literatura y concluya.

ACTIVIDADES COMPLEMENTARIAS

1. *Investiga la diferencia entre conductividad equivalente y conductividad molar*
2. *Investiga por qué se utiliza corriente alterna en las mediciones de conductividad de iones en solución*
3. *Realiza una revisión hemerográfica de las enzimas más utilizadas en la industria química.*
4. ***Investiga qué características presentan las enzimas termófilas?***
5. *Investiga los diversos mecanismos de inhibición enzimática*
6. *Investiga en qué consiste la cinética de relajación y su aplicación en enzimas*
7. *Explica la utilidad de la ecuación Eadie-Hofstee para la cinética enzimática*
8. *Investiga el concepto de número de recambio de una enzima*
9. *¿Cuáles son las enzimas alostéricas*
10. *Investiga por qué este protocolo se realiza sin solución amortiguadora?*
11. *Explica la diferencia entre el concepto de unidad enzimática y el concepto de centro de actividad catalítica.*
12. *Investigue el proceso de hidrólisis de urea para producción de amoníaco a nivel industrial*

BIBLIOGRAFÍA

- Chang, R. (2000) Fisicoquímica para las ciencias químicas y biológicas, Mc Graw Hill. 3ª ed, México.
- Fersht, A.: Enzyme Structure and Mechanism. 2nd Edition W. H. Freeman and Company, New York, 1985.
- Fonseca, G. L y Berrocal, B. L. (2004).
- Frost, A. A. and Pearson, R.C. (1961). Kinetics and mechanism. John Wiley and Sons. N.Y.
- Hu, G., Pojman, J. A., Scott, S. K., Wrobel, M.M., and Taylor, A. F. (2010) Base-catalyzed Feedback in the Urea-Urease Reaction. J. Phys. Chem. B, 114, 14059-14063.
- Lehninger, A. L. (1982). Bioquímica: "Las Bases Moleculares de la Estructura y Función Celular". Segunda edición. Ediciones Omega, Barcelona.
- Obaya, A., Vargas-Rodríguez, Y. M. (2011) La Enseñanza Experimental de la Química desde una Perspectiva Interdisciplinaria y Ecológica En Química Verde Experimental (27-34). México. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Vargas, M & Obaya, A. (2011). Cinética Química y Catálisis Verde. En Química Verde Experimental. (pp. 189-215). México: Universidad Nacional Autónoma de México.
- Vargas, M. & Obaya A. (2005). Cálculo de parámetros de rapidez en cinética Química y enzimática. (1ª Ed.) Universidad Nacional Autónoma de México, México.
- Wybe Kroontje, W.T. C. (1962) Urea Hydrolysis, Conductivity Method for Estimation of Urease Activity. J. Agric. Food Chem. 10, 347-348

HOJA DE RESULTADOS PARA EL PROFESOR

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No. 7

DESCOMPOSICIÓN DE UREA POR UREASA

Integrantes del quipo:

1. _____

2. _____

3. _____

4. _____

Profesor _____

Carrera _____

Grupo _____

Semestre _____

Fecha _____

7.1 Resultados de conductividad en función del tiempo

TIEMPO (s)	TEMPERATURA (°C)			
	Ambiente	40	50	60
10				
20				
30				
40				
50				
60				
70				
80				
90				
100				
110				
120				

HOJA DE RESULTADOS PARA EL PROFESOR

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No. 7 DESCOMPOSICIÓN DE UREA POR UREASA

Integrantes del quipo:

1. _____
2. _____
3. _____
4. _____

Profesor _____

Carrera _____

Grupo _____

Semestre _____

Fecha _____

Tabla 7.2 Resultados de conductividad. Temp _____ °C

TIEMPO (s)	CONDUCTIVIDAD				
	0.004 M	0.008 M	0.012 M	0.016 M	0.02 M
10					
20					
30					
40					
50					
60					
70					
80					
90					
100					
110					
120					

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No. 8

CINÉTICA DE ADSORCIÓN DE AZUL DE METILENO

INTRODUCCIÓN

La adsorción es un fenómeno fisicoquímico fundamental en la catálisis heterogénea, y es el resultado entre la atracción del catalizador sólido (adsorbente) y el fluido o las sustancias disueltas en el fluido (adsorbato). La adsorción puede ser física o química. La adsorción física o fisisorción se debe a fuerzas de Van der Waals y a las interacciones dipolo-dipolo, este tipo de adsorción es de gran interés en la catálisis heterogénea ya que proporciona a través de los métodos de BET y (BJH), el área superficial del catalizador, y el volumen y distribución de tamaño de poro del mismo. La adsorción química o quimisorción implica la formación de enlaces químicos y requiere una transferencia de electrones entre adsorbente y adsorbato, la importancia de la quimisorción sobre el catalizador, permite conocer los mecanismos de reacción catalíticos.

En esta práctica se adsorberá azul de metileno en solución acuosa sobre una bentonita comercial, adquirida de Minerex, la cual presenta una superficial específica de $101 \text{ m}^2/\text{g}$.

OBJETIVOS ACADÉMICOS

- Investigar el concepto de adsorción
- Comprender la adsorción como una etapa fundamental del mecanismo de reacción de la catálisis heterogénea.
- Adsorber azul de metileno sobre una adsorbente natural (bentonita activada)
- Determinar el orden de la adsorción de azul de metileno en bentonita

OBJETIVOS DE LA QUÍMICA VERDE

- Minimización de residuos (1). Factor de eficiencia en masa 0.00400
- Economía atómica alta (2), 100%
- Experimento con sustancias de toxicidad reducida (3)
- Experimento con toxicidad reducida (4)
- Eliminación de sustancias auxiliares (5)
- Disminución del consumo energético (6)
- No fue necesaria la formación de grupos de bloqueo (8)
- Se muestra la etapa de adsorción de la catálisis (9)
- Monitoreo en tiempo real del proceso (11)
- Minimización del riesgo potencial de accidentes químicos (12)

PROBLEMA INTEGRADOR

Determinar la cinética de adsorción de azul de metileno en bentonita.

ACTIVIDADES PREVIAS A LA PRÁCTICA

Investigar cuáles son las diferencias entre la quimisorción y la fisisorción?

Averiguar cuál es el mecanismo de adsorción?

Indagar los tipos de isothermas que se presentan en la adsorción.

Buscar en la literatura cuál es la longitud de onda de máxima absorción del azul de metileno.

Revisar en las hojas de seguridad las propiedades químicas, físicas y toxicológicas de reactantes y productos.

Elaborar un diagrama de flujo ecológico que incluya el tratamiento y disposición de los residuos, con pictogramas y rombos de seguridad

Analizar cada principio de la química verde para este experimento y comparar con los resultados sugeridos en los objetivos de la química verde.

Utilizar las cartas de color en el diagrama de flujo, de acuerdo a la metodología descrita en los apéndices.

EQUIPO(S), REACTIVO(S), Y MATERIALE(S)

MATERIAL	EQUIPO	REACTIVOS
Por equipo 1 Pipeta graduada de 5 mL 1 Piseta 1 Espátula 1 Vaso de precipitados de 100 mL	Por equipo: 1 Espectrofotómetro visible 2 Celdas para el espectrofotómetro	Por equipo: 4 mg de bentonita activada 4 mL de disolución de azul de metileno de concentración 10 ppm
	Por grupo: 1 Balanza analítica	

DESARROLLO EXPERIMENTAL

1. Encienda el espectrofotómetro y calibre en cero con agua destilada a 630 nm
2. Pese 4 mg de arcilla, directamente en la celda del espectrofotómetro.
3. Adicione suavemente por las paredes de la celda, 4 mL de disolución de azul de metileno (10 ppm). Al momento de adicionar la mitad de la disolución de azul de metileno, tome el tiempo como cero.
4. Coloque rápidamente la celda en el espectrofotómetro y tome lecturas cada 15 segundos por 7 minutos.

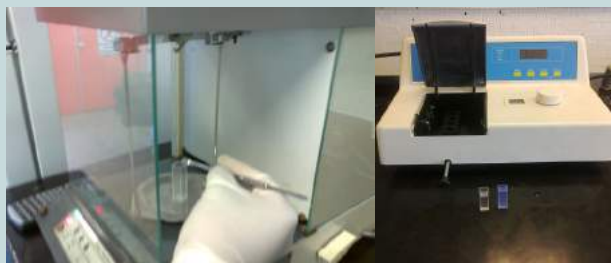


Figura 8.1 Montaje experimental de la cinética de adsorción

RESULTADOS

1. Los datos de absorbancia en función del tiempo (Tabla 8.1).

Tabla 8.1. Resultados de Absorbancia

TIEMPO (s)	ABSORBANCIA	TIEMPO (s)	ABSORBANCIA
0		180	
15		210	
30		240	
45		270	
6		300	
75		330	
90		360	
105		390	
120		420	
150			

ORIENTACIONES PARA EL TRATAMIENTO Y DISPOSICIÓN DE RESIDUOS

Deje los residuos en un frasco transparente, etiquetado con el nombre del experimento y la fecha, en la siguiente sesión experimental, el azul de metileno habrá sido adsorbido totalmente por la arcilla, entonces filtre, el líquido es inocuo, deseche por el drenaje, guarde el sólido en frasco etiquetado. (Figura 8.1).

INSTRUCCIONES PARA LA ELABORACIÓN DEL REPORTE

1. Trace el gráfico de absorbancia vs del tiempo (s).
2. Ajuste el gráfico a una regresión polinomial y obtener el valor de absorbancia a tiempo cero.
3. Determine el orden del proceso de adsorción de azul de metileno (Utilizar el método integral gráfico)
4. Discuta ampliamente los resultados y de sus conclusiones.

ACTIVIDADES COMPLEMENTARIAS

1. *Explica la diferencia entre adsorción física y adsorción química*
2. *Qué se representa a través de la isoterma de Langmuir*
3. *Investiga las zonas dónde en México se encuentra la arcilla bentonita en forma natural.*
4. *Investiga que tipo de adsorbentes para eliminar color se utilizan en la industria alimentaria y en la industria farmacéutica.*
5. *Investiga que tipo de adsorbentes se utilizan para la limpieza de efluentes, en particular de la industria textil.*

ANÁLISIS DESDE EL PUNTO DE VISTA DE LA QUÍMICA VERDE

Factor de eficiencia:

Se generan 4 mL de residuos por equipo, por lo tanto en este experimento el factor de eficiencia es 0.004, además de 4 mg de arcilla.

$$E_m = \frac{\text{volumen de residuos (Kg)}}{\text{práctica de laboratorio por equipo de trabajo}} = \frac{0.004004}{1} = 0.004004$$

Economía atómica:

La adsorción a tiempo infinito se lleva a cabo al 100%, por lo tanto la economía atómica es del 100%

Tabla 8.2 Análisis desde el punto de vista de la Química Verde del experimento de cinética de adsorción de azul de metileno sobre bentonita

No.	Observacion del principio en el práctica	Cumple
1	La mezcla de los reactantes sólo requiere del volumen equivalente al del volumen de la celda del espectrofotómetro, en este caso 4 mL (semimicro), por lo que la cantidad de residuos se minimiza.	√
2	El fenómeno de adsorción a tiempo infinito (168 h), se lleva a cabo al 100%, por lo tanto el líquido es agua, y el sólido es azul de metileno/bentonita.	√
3	El experimento utiliza y generan materiales con toxicidad reducida.	√
4	Reducir la toxicidad de los productos o residuos, pero mantener el objetivo del experimento.	√
5	El avance de la reacción se realizó por métodos físicoquímicos, eliminando el uso de sustancias auxiliares.	√
6	Todo el experimento se desarrolla a temperatura y presión ambiente, disminuyendo el consumo energético	√
7	La materia prima no es renovable	No cumple
8	No fue necesaria la formación de grupos de bloqueo. No aplica este principio	√
9	No es necesario el uso de un catalizador. No aplica este principio	√
10	La bentonita es ecoamigable, pero tiene azul de metileno, el cual no es biodegradable.	No cumple
11	El experimento se monitorea en tiempo real	√
12	Al utilizar azul de metileno en concentración de 4 ppm, se minimizó el riesgo potencial de accidentes químicos.	√

Este experimento cumple con diez de los doce principios de la Química Verde por lo tanto al diagrama de flujo ecológico le corresponde el matiz RGB: 157, 196,26.

Los residuos requieren tratamiento posterior. 255, 237,0

BIBLIOGRAFÍA

- Obaya, A., Vargas-Rodríguez, Y. M. (2011) La Enseñanza Experimental de la Química desde una Perspectiva Interdisciplinaria y Ecológica. En Química Verde Experimental (27-34). México. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Vargas, M & Obaya, A. (2011). Cinética Química y Catálisis Verde. En Química Verde Experimental (pp. 189-215). México: Universidad Nacional Autónoma de México.
- Vargas, M. & Obaya A. (2005). Cálculo de parámetros de rapidez en cinética química y enzimática. (1ª Ed.) Universidad Nacional Autónoma de México, México
- Vargas-Rodríguez, Y. M., Obaya, A, Vargas, G. I. (2012) Regresión polinomial una competencia indispensable para el tratamiento de datos en cinética química. 4º Congreso Internacional Sobre la Enseñanza y Aplicación de las Matemáticas. FES C UNAM 2012.

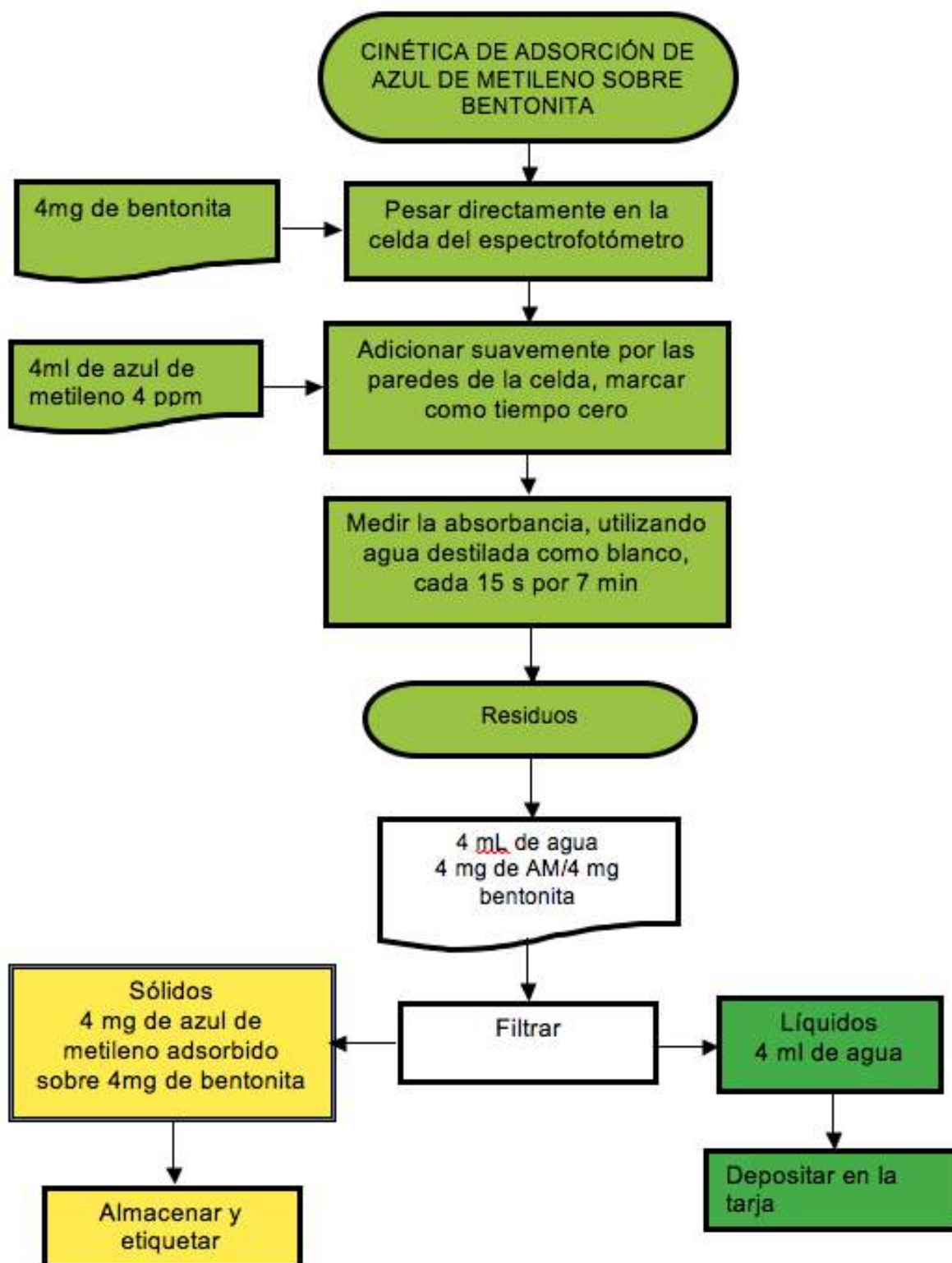


Diagrama 8.1. Diagrama de flujo ecológico del experimento de catálisis enzimática

Principio	Evaluación
Prevenir y/o minimizar residuos	Em= 4.004 (√)
Economía atómica	AE= 100%
Utilizar y generar sustancias con el mínimo de toxicidad	√
Experimentos eficaces pero no tóxicos	√
Reducir el uso de sustancias auxiliares	√
Disminuir el consumo energético	√
Utilizar materias primas renovables	No cumple
Evitar derivados innecesarios	√
Preferir la catálisis	√
Generar productos biodegradables	Cumple Parcialmente
Analizar los procesos en tiempo real	√
Minimizar el riesgo de accidentes químicos	√
No.PQVCE	10
Color RGB	157,196,26
Color RGB (residuos)	255, 237,0 79, 174, 50

HOJA DE RESULTADOS PARA EL PROFESOR

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No. 8 CINÉTICA DE ADSORCIÓN DE AZUL DE METILENO

Integrantes del quipo:

1. _____
2. _____
3. _____
4. _____

Profesor _____

Carrera _____

Grupo _____

Semestre _____

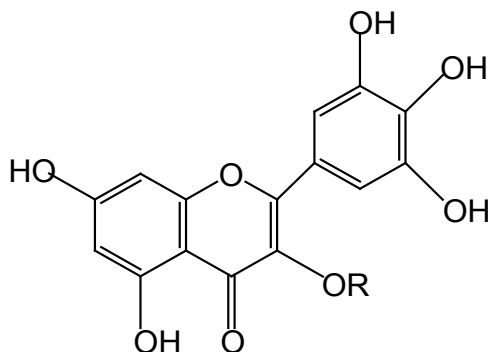
Fecha _____

Tabla 8.1. Resultados de Absorbancia

TIEMPO (s)	ABSORBANCIA	TIEMPO (s)	ABSORBANCIA
0		180	
15		210	
30		240	
45		270	
6		300	
75		330	
90		360	
105		390	
120		420	
150			

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No. 9

CINÉTICA DE ADSORCIÓN ANTOCIANINAS DE JUGO DE ARÁNDANO EN BENTONITA



Esquema 9.1 Antocianina

INTRODUCCIÓN

La adsorción es un fenómeno fisicoquímico fundamental en la CATÁLISIS heterogénea, y es el resultado entre la atracción del catalizador sólido (adsorbente) y el fluido o las sustancias disueltas en el fluido (adsorbato). La adsorción puede ser física o Química. La adsorción física o fisio ción se debe a fuerzas de Van der Waals y a las interacciones dipolo-dipolo, este tipo de de adsorción es de gran interés en la CATÁLISIS heterogénea ya que proporciona a través de los métodos de BET y (BJH), el área superficial del catalizador, y el volumen y distribución de tamaño de poro del mismo. La adsorción Química o quimisorción implica la formación de enlaces químicos y requiere una transferencia de electrones entre adsorbente y adsorbato, la importancia de la quimisorción sobre el catalizador, permite conocer los mecanismos de reacción catalíticos.

Los arándanos contienen fi oquímicos conocidos como antocianinas, que les dan su color rojo. El jugo de arándano comercial generalmente se presenta en mezcla con jugo de manzana. El jugo de arándano tiene una absorbancia máxima a 520 nm, en tanto que el de manzana tiene una absorbancia mínima a esa longitud de onda, por lo tanto se puede realizar a 520 nm un estudio de la adsorción de jugo de arándano sobre una bentonita comercial (Minerex), la cual presenta una superficial específica de $101 \text{ m}^2/\text{g}$.

OBJETIVOS ACADÉMICOS

- Investigar el concepto de adsorción
- Comprender la adsorción como una etapa fundamental del mecanismo de reacción de la catálisis heterogénea.
- Adsorber el colorante del jugo de arándano de un bebida comercial en un adsorbente natural (bentonita activada)
- Estudiar la adsorción del colorante del jugo de arándano en bentonita

OBJETIVOS DE LA QUÍMICA VERDE

- Minimización de residuos (1). Factor de eficiencia en masa 0.00400
- Economía atómica alta (2), 100%
- Experimento con sustancias de toxicidad reducida (3)
- Experimento con toxicidad reducida (4)
- Eliminación de sustancias auxiliares (5)
- Disminución del consumo energético (6)
- Utiliza materias primas renovables (7)
- No fue necesaria la formación de grupos de bloqueo (8)
- Se muestra la etapa de adsorción de la catálisis (9)
- Monitoreo en tiempo real del proceso (11)
- Minimización del riesgo potencial de accidentes químicos (12)

PROBLEMA INTEGRADOR

Determinar la cinética de adsorción de la antocianina presente en el jugo de arándano sobre bentonita.

ACTIVIDADES PREVIAS A LA PRÁCTICA

Investigar los usos y aplicaciones de las antocianinas del jugo de arándano.

Indagar qué tipo de jugos de arándano que puede adquirir en su localidad.

Llevar el día de la actividad experimental 250 mL de jugo de arándano comercial

Revisar en las hojas de seguridad las propiedades químicas, físicas y toxicológicas de reactantes y productos.

Elaborar un diagrama de flujo ecológico que incluya el tratamiento y disposición de los residuos, con pictogramas y rombos de seguridad.

Comparar este protocolo con el descrito para la cinética de adsorción de azul de metileno sobre bentonita.

Analizar cada principio de la química verde para este experimento y comparar con los resultados sugeridos en los objetivos de la química verde.

Utilizar las cartas de color en el diagrama de flujo, de acuerdo a la metodología descrita en los apéndices.

EQUIPO(S), REACTIVO(S), Y MATERIAL(ES)

MATERIAL	EQUIPO	REACTIVOS
Por equipo 1 Pipeta graduada de 5 mL 1 Piseta 1 Espátula 1 Vaso de precipitados de 100 mL	Por equipo: 1 Espectrofotómetro visible 2 Celdas para el espectrofotómetro	Por equipo: 4 mg de bentonita activada con ácido 4 mL de disolución de índigo de concentración de 10 ppm
	Por grupo: 1 Balanza analítica	

DESARROLLO EXPERIMENTAL

1. Prenda el espectrofotómetro y calibrar en cero con agua destilada a 536 nm
2. Pese 15 mg de arcilla, directamente en la celda del espectrofotómetro.
3. En un vaso de precipitados de 10 mL, mezcle dos mL de agua y 2 mL de jugo de arándano, homogenice.
4. Adicione suavemente a la celda con arcilla, los 4 mL del jugo de arándano. Al momento de adicionar tome el tiempo como cero y coloque la celda en el espectrofotómetro.
5. Mida la absorbancia de la solución, cada 15 segundos por 7 min.



Figura 9.1 Experimento de adsorción de jugo de arándano. En el vaso de precipitados se presenta el jugo de arándano diluido al 50%. En el tubo de ensaye se observa en el fondo la bentonita que ha adsorbido parte del color presente en el jugo.

TABLAS DE RESULTADOS

1. Los datos de absorbancia en función del tiempo (Tabla 24).

Tabla 9.1 Resultados de Absorbancia.

TIEMPO (s)	ABSORBANCIA	TIEMPO (s)	ABSORBANCIA
0		180	
15		210	
30		240	
45		270	
60		300	
75		330	
90		360	
105		390	
120		420	
150			

ORIENTACIONES PARA EL TRATAMIENTO Y DISPOSICIÓN DE RESIDUOS

Filtre los residuos. El sólido es ecoamigable, desechar en la basura. El líquido es jugo de arándano, el cual es biotransformable.

INSTRUCCIONES PARA LA ELABORACIÓN DEL REPORTE

- 1. Trace el gráfico de absorbancia vs. tiempo (s).
- 2. Realice una regresión polinómica y establezca la absorbancia a tiempo cero.
- 3. Determine el orden del proceso de adsorción de la antocianina en bentonita (Utilizar el método integral gráfico), suponga que la absorbancia es igual a la concentración de antocianina a tiempo t.

Tabla 9.2 Datos para el cálculo de orden de reacción por método integral gráfico

TIEMPO (s)	ABSORBANCIA	Orden cero x	Orden uno $\ln (A_0)/(A_0-x)$	Orden dos $A_0/A_0(A_0-x)$
0				
15				
30				
45				
60				
75				
90				
105				
120				
150				
180				
210				
240				
270				
300				
330				
360				
390				
420				

- 4. Justifique el resultado obtenido y concluir.

ACTIVIDADES COMPLEMENTARIAS

1. *Explica la diferencia entre adsorción física y adsorción química*
2. *Qué se representa a través de la isoterma de Langmuir*
3. *Investiga las zonas dónde en México se encuentra la arcilla bentonita en forma natural.*
4. *Investiga que adsorbentes para eliminar color se utilizan en la industria alimentaria y en la industria farmacéutica.*

ANÁLISIS DESDE EL PUNTO DE VISTA DE LA QUÍMICA VERDE

Tabla 9.3 Análisis desde el punto de vista de la química verde del experimento de cinética de adsorción de antocianinas del jugo de arándano sobre bentonita.

No.	Observacion del principio en el práctica	Cumple
1	La mezcla de los reactantes sólo requiere del volumen equivalente al del volumen de la celda del espectrofotómetro, en este caso 4 mL (semimicro), por lo que la cantidad de residuos se minimiza.	√
2	El fenómeno de adsorción a tiempo infinito (168 h), se lleva a cabo al 100%, por lo tanto el líquido es agua, y el sólido colorantes del jugo de arándano y manzana/bentonita.	√
3	El experimento es eficaz y la metodología seleccionada, presenta toxicidad reducida.	√
4	Reducir la toxicidad de los productos o residuos, pero mantener el objetivo del experimento.	√
5	El avance de la reacción se realizó por métodos físicoquímicos, eliminando el uso de sustancias auxiliares.	√
6	Todo el experimento se desarrolla a temperatura y presión ambientes, disminuyendo el consumo energético	√
7	La materia prima ha de ser preferiblemente renovable en vez de agotable, siempre que sea técnica y económicamente viable.	√
8	No fue necesaria la formación de grupos de bloqueo.	√
9	No es necesaria la catálisis.	√
10	Se deben diseñar experimentos de tal manera que al finalizar los productos y/o residuos que se obtengan, se degraden después de su uso.	Cumple
11	El monitoreo se hace en tiempo real.	√
12	Los materiales no son tóxicos, por lo tanto se minimizó el riesgo potencial de accidentes químicos.	√

Este experimento cumple con once principios de la química verde, por lo tanto al diagrama de flujo ecológico le corresponde el matiz RGB: 122, 185, 41
 Parte de los residuos son ecoamigables y la otra parte biodegradable, por lo tanto utilizar el matiz RGB: 79, 174, 50

BIBLIOGRAFÍA

- Edionwe, E., Villarreal, J. R. and Smith, K. C. (2011) How Much Cranberry Juice Is an Cranberry-Apple Juice? A General Chemistry Spectrophotometric Experiment. *J. Chem. Educ.* 88, 1410–1412
- Logan, S. R. (2000) *Fundamentos de cinética Química*. Addison Wesley, México
- Obaya, A., Vargas-Rodríguez, Y. M. (2011) La Enseñanza Experimental de la Química desde una Perspectiva Interdisciplinaria y Ecológica En *Química Verde Experimental* (27-34). México. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Shaw, D.J. (1977). *Introducción a la Química de superficies y coloides*. (2ª Ed). Editorial Alhambra. Madrid.
- Vargas, M & Obaya, A. (2011). *Cinética Química y Catálisis Verde*. En *Química Verde Experimental* (pp. 189-215). México: Universidad Nacional Autónoma de México.
- Vargas, M & Obaya, A. (2011). *Cinética Química y Catálisis Verde*. En *Química Verde Experimental* (pp. 189-215). México: Universidad Nacional Autónoma de México.
- Broughton, D. B & Wentworth, R. L. (1947) Mechanism of decomposition of Hydrogen Peroxide Solutions with Manganese Dioxide. I. *Journal American Chemical Society*, 69, 741-744.
- Vargas, M. & Obaya A. (2005). *Cálculo de parámetros de rapidez en cinética Química y enzimática*. (1ª Ed.) Universidad Nacional Autónoma de México, México
- Vargas-Rodríguez, Y. M., Obaya, A, Vargas, G. I. (2012) Regresión polinomial una competencia indispensable para el tratamiento de datos en cinética química. 4º Congreso Internacional Sobre la Enseñanza y Aplicación de las Matemáticas. FES C UNAM 2012.

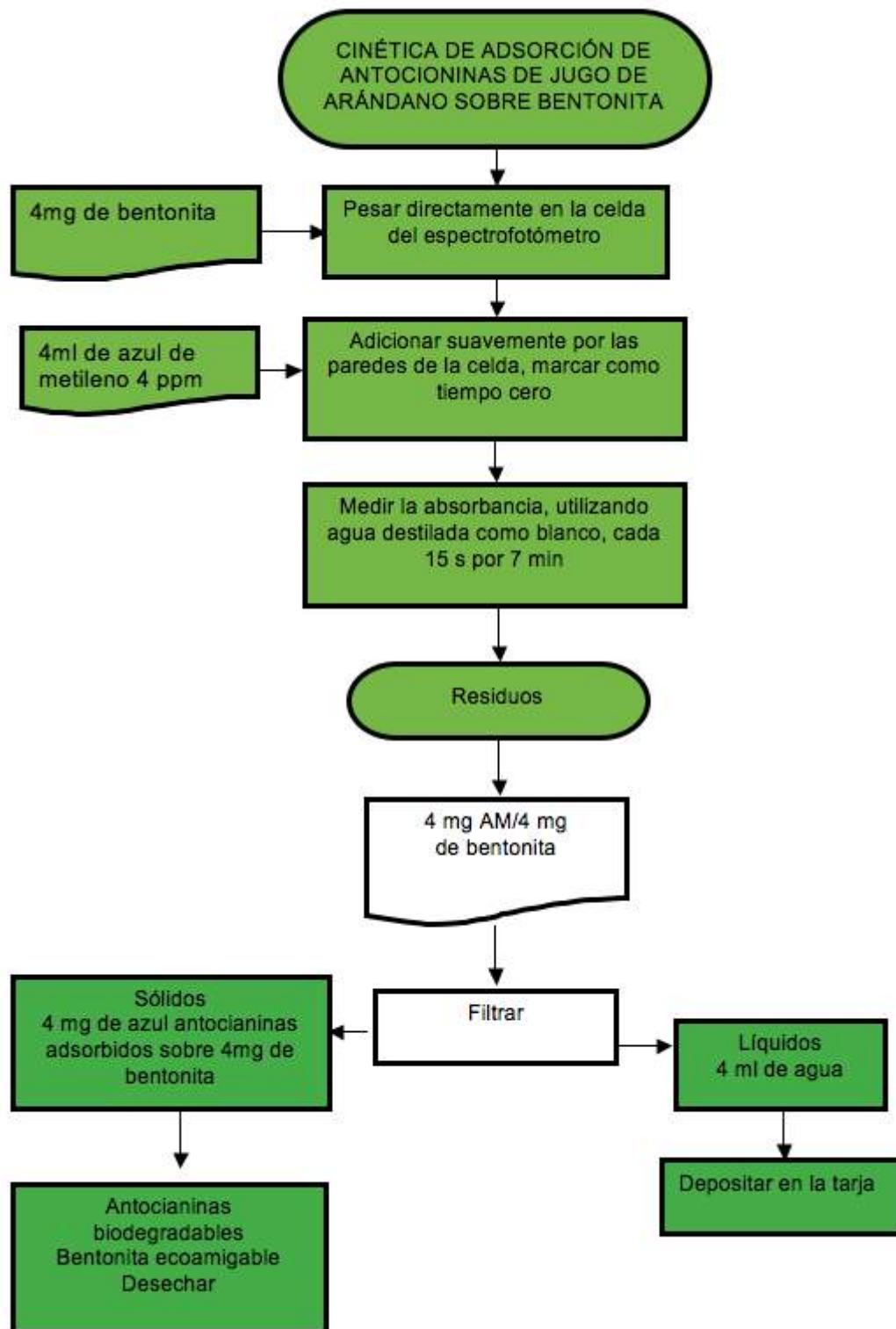


Diagrama 9.1. Diagrama de flujo ecológico del experimento cinética de adsorción de azul de metileno sobre bentonita.

Principio	Evaluación
Prevenir y/o minimizar residuos	Em= 4.004 (√)
Economía atómica	AE= 100%
Utilizar y generar sustancias con el mínimo de toxicidad	√
Experimentos eficaces pero no tóxicos	√
Reducir el uso de sustancias auxiliares	√
Disminuir el consumo energético	√
Utilizar materias primas renovables	√
Evitar derivados innecesarios	√
Preferir la catálisis	√
Generar productos biodegradables	Cumple Parcialmente
Analizar los procesos en tiempo real	√
Minimizar el riesgo de accidentes químicos	√
No.PQVCE	11
Color RGB	122,185,41

HOJA DE RESULTADOS PARA EL PROFESOR

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No. 9
CINÉTICA DE ADSORCIÓN ANTOCIANINAS DE JUGO DE ARÁNDANO EN BENTONITA

Integrantes del quipo:

1. _____
2. _____
3. _____
4. _____

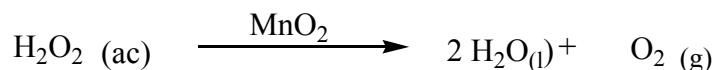
Profesor _____
Carrera _____
Grupo _____
Semestre _____
Fecha _____

Tabla 9.1 Resultados de Absorbancia

TIEMPO (s)	ABSORBANCIA	TIEMPO (s)	ABSORBANCIA
0		180	
15		210	
30		240	
45		270	
60		300	
75		330	
90		360	
105		390	
120		420	
150			

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No.10

DESCOMPOSICIÓN DEL PERÓXIDO DE HIDRÓGENO



Esquema 10.1- Reacción de descomposición de peróxido de hidrógeno

INTRODUCCIÓN

El mecanismo de la catálisis heterogénea ocurre en cinco etapas: a) difusión de las moléculas reaccionantes, de la fase fluida, hasta la superficie del catalizador. b) adsorción de las moléculas, reaccionantes, en la superficie del catalizador, c) reacción en la superficie catalítica, d) desorción de los productos de la superficie catalítica y e) difusión de los productos hacia la fase fluida. Es importante mencionar que la rapidez de las reacciones está determinada por las etapas más lentas. Al respecto las etapas a) y e) son muy rápidas por lo que generalmente no constituyen un factor importante en la rapidez de la reacción. Por lo tanto alguna de las etapas b), c) o d) puede ser la más lenta y esto se reflejado en la ecuación cinética

La descomposición del peróxido de hidrógeno puede realizarse por medio de catálisis heterogénea, utilizando óxido de manganeso como catalizador. La reacción genera como productos oxígeno y agua (Esquema 10.1), es importante notar que al tener un producto gaseoso la cinética de la reacción se sigue fácilmente a través de la medición del volumen de oxígeno desprendido.

OBJETIVOS ACADÉMICOS

- Estudiar la cinética de una reacción que se lleva a cabo por catálisis heterogénea.
- Determinar el orden de reacción de la descomposición del peróxido de hidrógeno utilizando óxido de manganeso (IV) como catalizador.

OBJETIVOS DE LA QUÍMICA VERDE

- Minimización de residuos (1). Factor de eficiencia en masa 0.10
- Economía atómica alta (2), 100%
- Experimento con sustancias de toxicidad reducida (3)
- Residuos con toxicidad reducida (4)
- Eliminación de sustancias auxiliares (5)
- Disminución del consumo energético (6)
- No fue necesaria la formación de grupos de bloqueo (8)
- Se utilizó la catálisis (9)
- Residuos biodegradables (10)
- Monitoreo en tiempo real del proceso (11)
- Minimización del riesgo potencial de accidentes químicos (12)

PROBLEMA INTEGRADOR

Determinar la ecuación cinética de la reacción de descomposición de peróxido de hidrógeno catalizada por óxido de manganeso (IV).

ACTIVIDADES PREVIAS AL EXPERIMENTO

Investigar las características de la catálisis heterogénea.

Revisar en la literatura qué órdenes de reacción son los más comunes en catálisis heterogénea.

Averiguar qué tipo de catalizadores se utilizan en los procesos de hidrogenación, oxidación, isomerización, etcétera.

Revisar en las hojas de seguridad las propiedades químicas, físicas y toxicológicas de reactantes y productos.

Elaborar un diagrama de flujo ecológico que incluya el tratamiento y disposición de los residuos, con pictogramas y rombos de seguridad

Analizar cada principio de la química verde para este experimento y comparar con los resultados sugeridos en los objetivos de la química verde.

Utilizar las cartas de color en el diagrama de flujo, de acuerdo a la metodología descrita en los apéndices

Utilizar las cartas de color en el diagrama de flujo, de acuerdo a la metodología descrita en los apéndices.

EQUIPO(S), REACTIVO(S), Y MATERIALE(S)

MATERIAL	EQUIPO	REACTIVOS
Por equipo: 1 Embudo de separación de 60 mL 1 Bureta de 25 mL 2 Soportes universales con pinzas 1 Matraz kitazato de 125 mL con tapón de hule 2 Mangueras de hule látex 1 Termómetro 1 Cronómetro 1 Cristalizador 1 Barra magnética 1 Matraz volumétrico de 100 mL 1 Pipeta volumétrica de 1 mL 1 Espátula	Por equipo: 1 parrilla con agitación magnética	Por equipo: 1 mL de agua oxigenada (H_2O_2 al 3.5%) 1 g de óxido de manganeso (IV)

DESARROLLO EXPERIMENTAL

1. Arme el aparato mostrado en la figura 10.1. Quite el tapón al matraz kitazato y abra las llaves del embudo y de la bureta.
2. Adicione agua al embudo, hasta que el nivel del agua sea aproximadamente cero en la bureta y el nivel del embudo quede aproximadamente al 75 % de su capacidad.
3. Agregue a un matraz aforado de 100 mL, 1 mL de agua oxigenada al 3.5 % (11 volúmenes) y afora a 100 mL con agua destilada.
4. Vacíe la disolución de peróxido de hidrógeno al matraz kitazato.
5. Tape el matraz kitazato y revise que el nivel de agua de la bureta quede en cero, si no es así, adicione o quite agua del embudo de adición.
6. Destape el matraz kitazato y agregue 1 g de MnO_2 . Tape nuevamente el matraz kitazato cuidando el nivel de agua en la bureta. Comenzar lo más pronto posible a agitar magnéticamente, al mismo tiempo que se pone en marcha el cronómetro.



Figura 10.1 Montaje experimental de la reacción de descomposición de peróxido de hidrógeno

7. Leer los niveles de agua en la bureta a los siguientes tiempos: $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{4}$, 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 4, 5, ..., 19 y 20 min, cuidando de no cambiar la rapidez de agitación durante todo el tiempo.
8. Incremente al máximo la rapidez de agitación de la mezcla y esperar unas 2 horas o hasta que el volumen de gas sea máximo (tiempo infinito), cuidando que la temperatura del baño de agua sea la misma que al inicio de la reacción.

ORIENTACIONES PARA TRATAMIENTO Y DISPOSICIÓN DE RESIDUOS

Filtre la mezcla de reacción, guarde el catalizador recuperado en un frasco etiquetado, este se volverá a activar para experimentos posteriores, el líquido es inocuo, deséchelo en el drenaje.

TABLA DE RESULTADOS

1. Datos de volumen del gas formado con respecto al tiempo Tabla 25.

Tabla 10.1.- Resultados de volumen en función del tiempo.

TIEMPO (min)	VOLUMEN (mL)	TIEMPO (min)	VOLUMEN (mL)
0		9	
0.25		10	
0.5		11	
0.75		12	
1		13	
1.5		14	
2		15	
2.5		16	
3		17	
4		18	
5		19	
6		20	
7		infinito	
8			

INSTRUCCIONES PARA LA ELABORACIÓN DEL REPORTE

1. Plantee la ecuación cinética para la reacción que se lleva a cabo en el experimento.
2. Determine las concentraciones iniciales, a tiempo t y a tiempo infinito, suponiendo que el gas se ajusta a una ecuación de estado de gas ideal a presión y temperatura constante.
3. Evalúe el orden de reacción utilizando el método de van Hoff con dos pendientes. Utilizar la regresión polinomial para obtener las pendientes.
4. Con base al orden de reacción obtenido de los resultados experimentales, proponga un mecanismo para la descomposición catalítica del peróxido de hidrógeno.
6. Investigue que otros catalizadores han sido utilizados para la descomposición de peróxido de hidrógeno y cuáles son sus energías de activación.
7. Averigüe los valores de energía de activación del proceso de descomposición de peróxido de hidrógeno con diferentes catalizadores.

ACTIVIDADES COMPLEMENTARIAS

1. *Establece un esquema dónde se representen la serie de procesos físicos y químicos que tienen lugar en la superficie de catalizadores sólidos.*
2. *Investiga qué supuestos son importantes para la obtención de datos experimentales en el estudio de la cinética y mecanismo de una reacción química.*
3. *Investiga las características principales de los llamados catalizadores bifuncionales. En qué tipo de procesos se emplean.*
4. *Define los factores que determinan de una forma macroscópica el diseño de un nuevo catalizador heterogéneo*

BIBLIOGRAFÍA

- Blanco, J. y Linarte, R. (1976) Catálisis: Fundamentos y Aplicaciones Industriales, Trillas, México.
- Brennan, D. & Tipper, C. F. H. (1974) Manual de laboratorio para prácticas de fisicoQuímica. (1ª ed). Urmo, Bilbao:
- Laidler, K. J. (1972) Cinética de reacciones: Reacciones en Disolución. (2ª. Ed). Alhambra. México.
- Logan, S. R. (2000) Fundamentos de cinética Química. Addison Wesley, México
- Obaya, A., Vargas-Rodríguez, Y. M. (2011) La Enseñanza Experimental de la Química desde una Perspectiva Interdisciplinaria y Ecológica En Química Verde Experimental (27-34). México. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Vargas, M. & Obaya A. (2005). Cálculo de parámetros de rapidez en cinética Química y enzimática. (1ª Ed.) Universidad Nacional Autónoma de México, México
- Vargas, M & Obaya, A. (2011). Cinética Química y Catálisis Verde. En Química Verde Experimental (pp. 189-215). México: Universidad Nacional Autónoma de México.

HOJA DE RESULTADOS PARA EL PROFESOR

ACTIVIDAD EXPERIMENTAL No.10 DESCOMPOSICIÓN DEL PERÓXIDO DE HIDRÓGENO

Integrantes del quipo:

1. _____
2. _____
3. _____
4. _____

Profesor _____

Carrera _____

Grupo _____

Semestre _____

Fecha _____

Tabla 10.1.- Resultados de volumen en función del tiempo.

TIEMPO (min)	VOLUMEN (mL)	TIEMPO (min)	VOLUMEN (mL)
0		9	
0.25		10	
0.5		11	
0.75		12	
1		13	
1.5		14	
2		15	
2.5		16	
3		17	
4		18	
5		19	
6		20	
7		infinito	
8			

PROYECTO

Elaborar un proyecto escrito en el que se fundamente la organización, estructuración y viabilidad de la propuesta de investigación, que además permita evaluar el proceso metodológico propuesto en la solución del problema; este escrito quedará como constancia de trabajo a ser desarrollado experimentalmente. Al finalizar el semestre deberá entregar el informe final completo, incluyendo resultados y análisis así como las conclusiones finales del proyecto.

El proyecto puede ser de varios tipos:

- 1) El diseño, adaptación o reproducción de una experiencia de cátedra
- 2) El diseño, adaptación, mejoramiento o reproducción de un experimento de laboratorio.
- 3) El diseño, adaptación, mejoramiento o reproducción de una investigación
- 4) El diseño, adaptación, mejoramiento o reproducción de un proceso industrial
- 5) Síntesis, caracterización y/o evaluación catalítica de un catalizador o sistema catalítico.

1) DEFINICIÓN DEL PROYECTO

Esta etapa consiste en una investigación bibliográfica, hemerográfica y/o cibergráfica, para después presentar al profesor los posibles proyectos a realizar. El profesor dará el visto bueno en función de los objetivos y de la viabilidad, dependiendo de los recursos materiales con los que cuenta el laboratorio.

2) PROTOCOLO DEL PROYECTO

Una vez obtenido la autorización para la realización del proyecto, se deberá entregar el Protocolo del Proyecto, el cual debe contener lo siguiente:

- a) Una carátula donde se indique Nombre del proyecto, Laboratorio, Grupo, Semestre e Integrantes del equipo
- b) Introducción
- c) Antecedentes
- d) Justificación
- e) Planteamiento del problema e hipótesis
- f) Objetivos
- g) Desarrollo experimental

En el desarrollo experimental se deberá incluir la secuencia metodológica, materiales y equipo, respecto al equipo que puede ser usado, este puede ser todo aquel que se encuentre disponible en el laboratorio, (potenciómetro, conductímetros, espectrofotómetros, refractómetros, etc.), resultados esperados y/o tratamiento de los mismos y cuando el proyecto lo permita un tratamiento estadístico.

- h) Conclusiones
- i) Bibliografía

En el caso de la bibliografía deberá ser presentada de acuerdo a lo siguiente:

Para libros. Autores, Título, Edición, Editorial, País, Año.

Para Publicaciones especializadas. Autores, Título de la revista, Número, Volumen, Páginas, Año

Para Cibergrafía se deberá escribir la dirección completa indicando fecha de consulta

3) EXPERIMENTACIÓN

Por motivos de calendario, la experimentación se deberá realizar en una sola sesión experimental

4) TRATAMIENTO Y/O DISPOSICIÓN DE RESIDUOS

5) INFORME

Al término del proyecto los autores deberán entregar un informe el cual deberá contener el siguiente formato:

- a) Nombre del proyecto
- b) Autores
- c) Introducción (Marco teórico)
- d) Objetivos
- e) Equipo, materiales y reactivos
- f) Metodología
- g) Resultados
- h) Análisis y/o tratamiento de resultados
- i) Conclusiones
- j) Bibliografía

6) PRESENTACIÓN DEL PROYECTO

Los resultados del proyecto deberán ser presentados ante el grupo por todos los autores, al término de la presentación se contará con una sesión de preguntas y respuestas. Las respuestas dadas por los autores serán tomadas en cuenta para la evaluación.

Cinética química aplicando los principios de la Química Verde (Actividades experimentales para Química Industrial)

Con base en los principios de la Química Verde, las actividades experimentales planteadas en este manual tienen un enfoque dirigido a evitar la utilización de sustancias auxiliares, reduciendo así la contaminación del medio ambiente y los problemas de la salud. Todas las metodologías contenidas aquí han sido diseñadas y adaptadas para ser menos peligrosas, utilizando materiales menos tóxicos y disminuyendo las concentraciones de reactivos para tener concentraciones suficientemente diluidas que se ajusten a la ecuación de Beer-Lambert.

