



UNIVERSIDAD  
POLITECNICA  
DE VALENCIA

# La Fuerza Impulsora en Cinética Química: cálculo a partir de la absorbancia

<b>Apellidos, nombre</b>	Atarés Huerta, Lorena (loathue@tal.upv.es)
<b>Departamento</b>	Departamento de Tecnología de Alimentos
<b>Centro</b>	ETSIAMN (Universidad Politécnica de Valencia)

## 1 Resumen de las ideas clave

En este objeto de aprendizaje se van a tratar bases teóricas de la Cinética Química. Se describirá el papel de la fuerza impulsora (FI) para la resolución de problemas y se hará hincapié en las ventajas de su utilización. Se resolverá un problema relacionado con esta temática en el que se calcula la FI a partir de valores de absorbancia.

## 2 Introducción

La Cinética Química (CQ) se encarga de estudiar la velocidad de las reacciones químicas <sup>[1]</sup>. Durante el transcurso de cualquier reacción química, la concentración de los reactivos disminuye en función del tiempo, y a su vez la concentración de los productos aumenta. Los problemas más básicos de CQ aportan resultados experimentales para la determinación de la constante cinética (k). Estos resultados están a menudo recogidos en tablas donde, en función del tiempo de reacción (t) se dan datos de la concentración de reactivo que continúa presente en el matraz de reacción. A partir de estos datos se deben utilizar las ecuaciones integradas para comprobar cuál es el orden de reacción y determinar el valor de k<sup>[2]</sup>.

Sin embargo, la concentración de reactivo a cada tiempo nunca es el resultado inmediato de los experimentos de laboratorio para estudiar la cinética de una reacción. En función de diferentes variables (si la reacción ocurre en disolución o en fase gas, si hay algún ácido o base que reaccione o se forme en función del tiempo, si hay algún reactivo o producto que aporte color...) se selecciona una propiedad para evaluar el avance de cada reacción <sup>[3]</sup>. Esta variable medida en el laboratorio puede utilizarse para el cálculo de k sin necesidad de calcular cuánto reactivo queda presente en función del tiempo. Para ello, es necesario calcular la fuerza impulsora.

## 3 Objetivos

Con la redacción de este artículo docente se persigue que los alumnos adquieran la capacidad de:

- Desarrollar la capacidad de calcular la fuerza impulsora correctamente
- Comprender la gran ventaja que supone la utilización de la fuerza impulsora en problemas de CQ, ya que elimina la necesidad de determinar la concentración de reactivo en función del tiempo de reacción
- Resolver problemas numéricos relacionados con los conceptos expuestos

## 4 Desarrollo

Para comenzar, se va a describir el concepto de fuerza impulsora y se expondrá la ecuación necesaria para calcularla. En el apartado 4.2. se planteará un problema numérico utilizando la FI.



## 4.1 La fuerza impulsora (FI)

Según los fundamentos de la CO, para demostrar que una reacción química es de orden 1 respecto al reactivo A, se debe comprobar que los datos de la concentración de A ([A]) respecto al tiempo de reacción (t) se ajustan a la ecuación integrada de orden 1 (ecuación 1):

$$\ln \frac{[A]}{[A]_0} = -k \cdot t \quad (\text{Ecuación 1})$$

Suponiendo que la constante de equilibrio de la reacción es muy elevada, la concentración de A tenderá a 0 y el cociente  $[A]/[A]_0$ , que inicialmente vale 1, disminuirá con el tiempo hasta anularse a tiempo infinito. Por lo tanto se puede afirmar que dicho cociente adimensional es la fuerza impulsora de la reacción, ya que describe su avance (vale 1 al inicio de la misma y 0 a tiempo infinito). Para comprobar que una reacción es de orden 1, se toma el valor de ese cociente y se ajusta su logaritmo neperiano frente al tiempo. La pendiente correspondería al valor de k con el signo cambiado.

Puesto que [A] nunca es el resultado inmediato de los experimentos de laboratorio para estudiar la cinética de una reacción, conviene poder expresar la fuerza impulsora a partir de la propiedad que se esté midiendo al llevar a cabo el experimento. La propiedad que se decida medir dependerá del tipo de reacción que se esté estudiando. Esta propiedad podría ser la presión total (en reacciones entre gases), el volumen de gas generado (en reacciones en disolución con productos gaseosos), la absorbancia (en reacciones en disolución con productos o reactivos coloreados) etc. De modo genérico, en adelante se va a llamar X a esa propiedad.

La propiedad X, al contrario que la concentración de reactivo, no tiene por qué disminuir frente al tiempo y si lo hace, no tiene por qué anularse a tiempo infinito. Es perfectamente posible, e incluso habitual, que X a tiempo infinito sea diferente de 0. Por lo tanto, para calcular correctamente FI a partir de X deberá tenerse en cuenta solamente la evolución de X frente al tiempo, restándose el valor de X a tiempo infinito. Por lo tanto, la expresión general de la fuerza impulsora quedará así (ecuación 2):

$$FI = \frac{X - X_\infty}{X_0 - X_\infty} \quad (\text{Ecuación 2})$$

Por supuesto, en casos concretos en los que el valor de X sí que se anule en el infinito, la expresión de FI quedaría simplificada a  $X/X_0$ .

Para comprobar que una reacción es de orden 1, se ajustaría el logaritmo neperiano de la FI frente al tiempo y la pendiente correspondería al valor de k con el signo cambiado.

## 4.2 Cálculo de la fuerza impulsora en un problema

Tras haber expuesto los conceptos básicos relativos a la fuerza impulsora se va a aplicar su cálculo a un problema numérico. Éste es el enunciado del problema:



*La cinética de la alcoholisis del cloruro de cinamoilo fue estudiada espectroscópicamente, y así se obtuvieron los siguientes valores de A en función de t. Comprueba que  $n=1$  y calcula k.*

<i>t (min)</i>	<i>0</i>	<i>20</i>	<i>40</i>	<i>70</i>	<i>100</i>	<i>120</i>	<i>150</i>	<i>200</i>	$\infty$
<i>A</i>	<i>0.378</i>	<i>0.339</i>	<i>0.295</i>	<i>0.246</i>	<i>0.204</i>	<i>0.178</i>	<i>0.148</i>	<i>0.107</i>	<i>0.006</i>

En este problema se describe el seguimiento de la cinética de una reacción que ocurre en disolución. Uno de los reactivos aporta color a la disolución del matraz de reacción, y por lo tanto la absorbancia puede medirse en función del tiempo para evaluar el progreso de la reacción. La utilización de este método no requiere de la extracción de muestras, puesto que la medida de la absorbancia no es incompatible con la evolución de la reacción.

La utilización de la fuerza impulsora elimina la necesidad de determinar la concentración de reactivo, puesto que FI se calcula directamente a partir de la propiedad determinada en el laboratorio (en este caso la absorbancia). A partir de los datos experimentales se calcula FI utilizando la ecuación ya descrita. Se añade una columna con la FI en la tabla (tabla 1)

Tabla 1: tabla original de datos del enunciado, donde se ha añadido el valor de la fuerza impulsora a cada tiempo.

t (min)	A	FI
0	0,378	1,000
20	0,339	0,895
40	0,295	0,777
70	0,246	0,645
100	0,204	0,532
120	0,178	0,462
150	0,148	0,382
200	0,107	0,272
inf	0,006	0,000

En este punto de la resolución del problema, siempre es una buena práctica comprobar que el valor de la FI es 1 a tiempo 0 y 0 a tiempo infinito. De no ser así, habría que revisar el cálculo de la FI. Finalmente se calcula el logaritmo neperiano de la fuerza impulsora y se ajusta frente al tiempo (tabla 2)



Tabla 2: tabla original de datos del enunciado, donde se ha añadido el valor de la fuerza impulsora y de su logaritmo neperiano a cada tiempo.

t (min)	A	FI	ln FI
0	0,378	1,000	0,000
20	0,339	0,895	-0,111
40	0,295	0,777	-0,252
70	0,246	0,645	-0,438
100	0,204	0,532	-0,631
120	0,178	0,462	-0,771
150	0,148	0,382	-0,963
200	0,107	0,272	-1,304
inf	0,006	0,000	-

El ajuste lineal del logaritmo neperiano de FI frente al tiempo da una pendiente de  $-0.0065$ , y por lo tanto  $k = 0.0065 \text{ min}^{-1}$ . El coeficiente de correlación  $R^2$  da  $0.99965$ .

## 5 Cierre

En este objeto de aprendizaje se han expuesto las bases teóricas de la utilización de la fuerza impulsora para la resolución de problemas de Cinética Química. Se ha planteado un problema y se ha resuelto utilizando la fuerza impulsora, con el fin de hacer ver al alumno la utilidad de este cálculo.

## 6 Bibliografía

- [1] [http://es.wikipedia.org/wiki/Cin%C3%A9tica\\_qu%C3%ADmica](http://es.wikipedia.org/wiki/Cin%C3%A9tica_qu%C3%ADmica)
- [2] FISICOQUÍMICA. Levine, I. N. McGraw-Hill. 1991
- [3] FUNDAMENTOS DE CINÉTICA QUÍMICA. S.R. Logan. Ed. Addison Wesley. 2000