

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE NICARAGUA.
UNAN – LEON
FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE QUIMICA**



**ESTUDIO CINETICO DE BROMACION
DEL ROJO DE METILO**

POR:

DOUGLAS MANUEL SANDOVAL GONZALEZ.

**PROPUESTA DE MONOGRAFIA,
SOMETIDO COMO REQUISITO PARA
OPTAR AL GRADO DE:**

LICENCIADO EN QUIMICA.

TUTOR: LICENCIADO JOSE E. SEQUEIRA S.

LEON, FEBRERO DEL 2004.

**ESTUDIO CINETICO DE BROMACION
DEL ROJO DE METILO.**

DEDICATORIA

Al llegar al término de esta jornada, basta ver el camino recorrido y recordar porque senda Dios me ha guiado y hasta que alturas me ha permitido llegar.

Dedico esta breve exposición Científica al autor y amigo entrañable (Jesucristo); quien no escatimó esfuerzos hasta llegar a la meta de su vida en la tierra : “ La salvación de la raza Humana “ y mía también.

De igual modo mi gratitud a mi abuela y madre querida María Nicolasa Novoa a mi madre Melba E. González mi esposa Flavia M. Bolaños y mis hijos Douglas Adonái Sandoval y Flavia Obed Sandoval .

Siendo ellos fuentes viva de inspiración de superación y aliento en los momentos de mayor dramatismo en mi vida, mi máxima realización como padre, esposo e hijo.

Br. Douglas M. Sandoval G.

Agradecimiento.

Dedico mi agradecimiento con mención especial al Licenciado José Esteban Sequeira mi tutor que me apoyó en estos momentos no sólo de palabras si no de obras; sin cuyos consejos esta obra monográfica no hubiera sido posible ; por ayudarme a ser parte de un proyecto de grandes alcances que apenas se perfilan en este inicio de labor, en este campo de la Química Experimental y de Estudio.

Puedo sentirme contento, de haber sido parte de este trabajo sobre “ La Cinética de bromación del Rojo de Metilo” el cual se llevo a cabo en el laboratorio de Química.

Mil gracias a todo los que dieron su aporte, para poder llevar a cabo este estudio , quiero también agradecer de manera personal a la biblioteca Central , por facilitarme los medios de investigación , al igual que la Escuela de Química por su aporte.

Indice

Páginas

I.- INTRODUCCION	1
A.- Generalidades	2
B.- Indicador Rojo de Metilo	3
C.- Estudio Cinético y Termodinámico	4
D.- Vida Media	9
E.- Dependencia de la Velocidad de Reacción con la Temperatura.....	10
II.-PARTE EXPERIMENTAL	
A.- Material Utilizado.....	14
B.- Procedimientos	15
III.- RESULTADOS	17
IV.- DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS.....	25
V.- CONCLUSION	26
VI.- REFERENCIAS	27
VIII.- ANEXOS	28

Objetivos.

Objetivo General:

- Proponer un método sencillo para realizar el estudio cinético de la reacción de bromación del rojo de metilo a diferentes temperaturas.

Objetivos Especificos:

1. Determinar la Energía de activación. (E_a)
2. Determinar la constante de velocidad. (K_v)
3. Determinar la vida media. ($t_{1/2}$)

Resumen.

En el presente trabajo se realizó el estudio cinético de la reacción de bromación del rojo de metilo. La reacción de bromación se llevó a cabo a diferentes temperaturas 80, 70, 60, 50, 40 y 30°C en un baño a temperatura constante. Se siguió la cinética de la reacción observando la decoloración de la muestra, como indicativo de que la reacción de bromación ha finalizado.

Sé determino gráficamente la E_a de la reacción la cual se calculó a partir de la pendiente obtenida de la representación gráfica del log del tiempo frente al inverso de la temperatura.

También se estudio la cinética de reacción de bromación del rojo de metilo utilizando el método espectrofotométrico, se tomaron lecturas de absorbancia a temperatura de 30°C y a diferentes tiempos, encontrándose que la reacción sigue una cinética de pseudo primer orden. Así mismo se calculó la constante de velocidad K_v para la reacción de pseudo primer orden y su vida media.

I.- Introducción.

La evolución vertiginosa que se desarrolla en todos los campos de la ciencia y la tecnología, han sido motivo de transformaciones, gracias al esfuerzo y dedicación de hombres que dan parte de su existencia a la investigación científica. Tal evolución proporciona al individuo un deseo de superación que indiscutiblemente ha de llevarlo a alcanzar el éxito deseado y a contribuir al progreso de la humanidad.

El papel esencial que desempeñan los indicadores en todos los campos de la química, han hecho que sean material de estudio desde la antigüedad, hasta nuestros días analizándolos en todos los aspectos tanto físicos como químicos y en la búsqueda de aplicarlos y desarrollarlos en nuevas técnicas analíticas.

Los indicadores son sustancias coloreadas que han sido utilizadas principalmente para conocer si una disolución es ácida, básica o neutra y para saber si una reacción química es completa o no.^{1,10}

Los indicadores ácido-base han sido útiles para ilustrar el cálculo de las constantes de disociación de ácidos y bases débiles, fundamentales en cualquier discusión de equilibrio homogéneo.

Por otro lado la reacción de halogenación (cloración o bromación) de los indicadores clasificados como azocolorantes¹, dentro de los que se encuentran el rojo de metilo, puede ser investigada de manera experimental teniendo aplicación en estudios cinéticos pues el curso de la reacción es fácilmente seguido por los cambios en la coloración y de esa manera determinar los parámetros como la Energía de activación, la Constante de velocidad y el tiempo de vida media lo cual es importante ya que se puede establecer un método sencillo de medición que encuentre utilidad a nivel de docencia para demostrar el cálculo de estos parámetros cinéticos en el campo de la físico-química.^{1, 2,7}

A.- Generalidades.

Los indicadores son sustancias orgánicas coloreadas que tienen la propiedad de cambiar su color cuando:

- Una disolución es ácida, básica o neutra (determinando la concentración de iones H^+)
- La precipitación es completa o no;
- Una reacción de oxidación – reducción es o no completa.(indicando el punto final de una valoración.)^{1,10,11}

Un indicador ácido-base es generalmente una molécula orgánica grande, que cambia rápidamente de color cerca del punto final cuando la acidez o basicidad de una disolución que contenga el indicador aumente o disminuya, sólo ligeramente.^{1, 10}

Una de las características deseable para un indicador es que sea estrecho el intervalo de viraje.^{1,10}

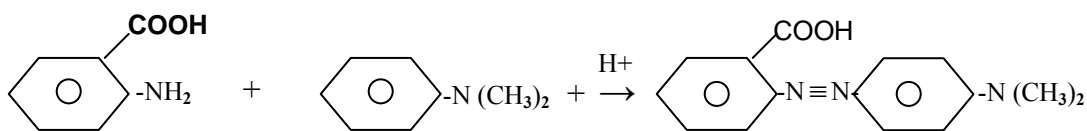
En la práctica, se puede calcular el pH esperado al final de determinada valoración y escoger así el indicador que vire cerca del valor calculado. Si se utiliza más de un indicador, es factible escoger el mejor teniendo en cuenta lo siguiente:

1. Experimentarlo con disoluciones tipos.
2. Preparando una mezcla a partir de las sustancias puras que estarán presentes en el punto de equivalencia de la reacción.

Entonces se puede medir el pH de la disolución preparada con indicadores seleccionados experimentalmente por valoración directa y por retroceso alrededor del punto final.^{1, 6,10}

B.- Indicador Rojo de Metilo.

El rojo de metilo, ácido 4-dimetilaminoazobenceno 2-carboxílico, es un compuesto azo que se produce por medio de una reacción de acoplamiento entre el ácido antranílico y la N, N-dimetilanilina:



Ácido Antranílico

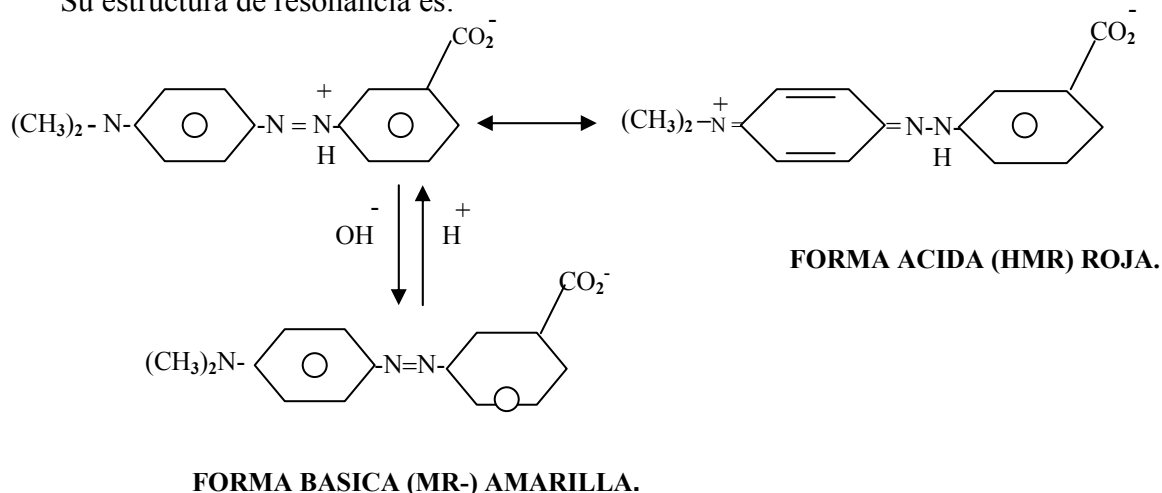
N, N-dimetilanilina

Rojo de Metilo

Es muy utilizado como indicador ácido-base en determinaciones analíticas. Es un agente tensoactivo y un efectivo antioxigenante especialmente para el caucho. Posee un peso molecular 269.31 gr/mol, y un punto de fusión 179.0 - 182°C, su formula general es $C_{15}H_{15}N_3O_2$.¹³

En solución acuosa el rojo de metilo existe en tres formas : un catión H_2M^+ , el es intensamente rojo – una especie HM, la cual es indudablemente un zwitterión debido a la similaridad de su espectro de absorción de H_2M^+ y un anión amarillo M^- . En solventes neutros como el benceno y el tetracloruro de carbono HM es amarillo indicando el zwitterión se revierte a la estructura no iónica: $(CH_3)_2NC_6H_4N\equiv NC_6H_4COOH$ como indicador ácido-base posee un rango de transición de PH 4.5 – 6.2 (Rojo, violeta, amarillo, café) posee dos $Pka_1=2.5$ y $Pka_2=5.1$.^{9, 10, 11}

Su estructura de resonancia es:



C.- Estudio Cinético y Termodinámico.

Una de las vías más indicadas para dar explicación a las leyes de interacción química han sido los métodos termodinámicos y cinéticos. Las teorías que han sido propuestas para explicar tales interacciones, se basan ampliamente en resultados experimentales.^{2,4,7}

A través de la termodinámica se alcanzan conclusiones sobre la base de los cambios de energía y entropía que acompañan a un cambio en un sistema.^{3,5}

Pero al estudiar la cinética de una reacción ésta nos garantiza la información acerca de la velocidad a la que ocurrirá cualquier cambio existente dentro de un proceso de reacción o el mecanismo por medio del cual se convertirán los reactivos en productos.

El estudio cinético se concentra fundamentalmente en demostrar y detallar el proceso por el cual un sistema se convierte de un estado inicial a un estado final y el tiempo que ha de requerir para que éste se produzca.^{4,7}

La velocidad a la cual una reacción ocurre depende de varios factores:

- La naturaleza de la reacción.
- La concentración de los reactivos.
- La temperatura.
- La presencia de posibles catalizadores.

Todos estos factores pueden marcadamente influir en la velocidad de reacción observada.

Algunas reacciones a temperatura ambiente son muy lentas, otras reacciones son esencialmente instantáneas.⁷

La temperatura ha sido uno de los factores que más ha influido para que la velocidad de una reacción se efectuó mas rápidamente estableciendo una relación directamente proporcional entre estos dos parámetros físicos, (temperatura y el tiempo) ^{4,7}

Para definir la velocidad de una reacción debemos de tener claro que esta depende de la velocidad de cambio con la concentración de cada una de las sustancias presentes en el proceso de reacción, ya sea como, reactante o producto.

Es convencional escribir una reacción química por medio de su ecuación estequiométrica dado que esta da la relación más sencilla entre el número de moléculas de reactivos y el número de moléculas de productos. ⁷

Sin embargo, no se puede suponer que la ecuación estequiométrica represente necesariamente el mecanismo del proceso molecular entre los reactivos.

Considérese una reacción química en la que un reactivo A se descompone para dar dos productos, B y C. ⁷

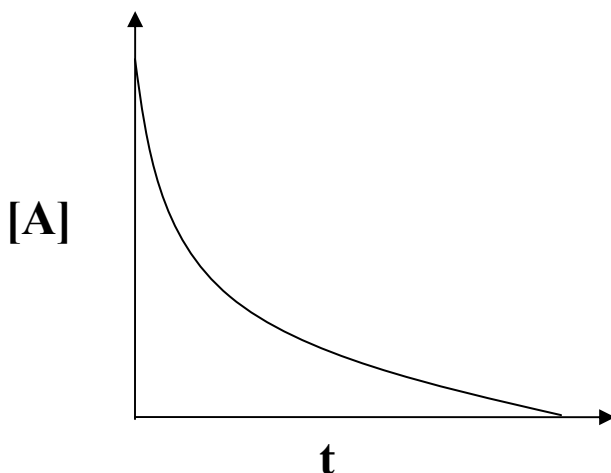


Fig. 1.0 Típica curva de concentración vrs tiempo.

De la gráfica ante expuesta se puede observar que a medida que transcurre la reacción, la concentración de **A** decrece mientras que las concentraciones de **B** y **C** aumentan.

La velocidad de reacción en cualquier instante **t** viene dada por la pendiente de la curva y es igual a la velocidad de decrecimiento de la concentración de **A**.⁷

$$Velocidad = -\frac{d[A]}{dt} \quad (1)$$

El signo menos significa, que la velocidad de reacción es igual a la velocidad de decrecimiento de la concentración de **A** con el tiempo. De igual manera, la velocidad está dada también por la velocidad de crecimiento de la concentración de **B** o de **C** con el tiempo.

$$Velocidad = +\frac{d[B]}{dt} = +\frac{d[C]}{dt}$$

Podemos expresar la ecuación de velocidad de la siguiente manera:

$$Velocidad = -\frac{d[A]}{dt} = +\frac{d[B]}{dt} = +\frac{d[C]}{dt} \quad (2)$$

Donde **t** representa el tiempo, los signos +/- representan la formación y consumo, respectivamente de los compuestos involucrados en la reacción.

Se ha encontrado que la velocidad de una reacción depende de la concentración de los reactivos, de modo que así como la concentración **A** en la reacción decrece, también lo hace la velocidad de reacción. De esta forma.⁷

$$Velocidad \propto [A]^n$$

Donde **n** es una constante conocida como **orden de reacción**. La relación entre la velocidad y la concentración se denomina **ecuación de velocidad** y toma la forma

$$-\frac{d[A]}{dt} = K_v \cdot [A]^n \quad (3)$$

Donde K_v es una **Constante de proporcionalidad**, denominada también **Constante cinética de velocidad** para cada reacción y ésta a su vez proporciona una medida útil de la velocidad de una reacción química a una temperatura determinada.

Según la ecuación (3), $d[A]/dt$, tiene unidades de concentración dividida por el tiempo, por lo tanto, las unidades de K_v son:

$$K_v = (\text{Concentración})^{1-n} \cdot (\text{tiempo})^{-1} \quad (4)$$

De esta manera las unidades de la constante cinética de velocidad varían en el orden de la reacción. Así por ejemplo, para una reacción de primer orden, $n=1$, y las unidades de K_v son $(\text{tiempo})^{-1}$ o S^{-1} .

Para una reacción de primer orden la ecuación (3) se reduce a la forma.

$$-\frac{d[A]}{dt} = K_v \cdot [A] \quad (5)$$

Para integrar esta ecuación vamos a suponer que al inicio de la reacción ($t=0$) la $[A]=[A]_0$ y que si ha transcurrido el tiempo t la $[A]=[A]_t$. Por tanto, al separar las variables e integrar, se obtiene.

$$-\int_{[A]}^{[A]_t} \frac{d[A]}{[A]} = K_v \int_0^t dt$$

$$-\ln[A]_t + \ln[A]_0 = K_v \cdot t$$

$$\log[A]_t = \log [A]_0 - \frac{K_v \cdot t}{2.303} \quad (6)$$

La ecuación (6) se puede probar graficando $\log [A]_t$ frente a t y la constante se evalúa mediante la pendiente como se muestra en la figura No. 2.

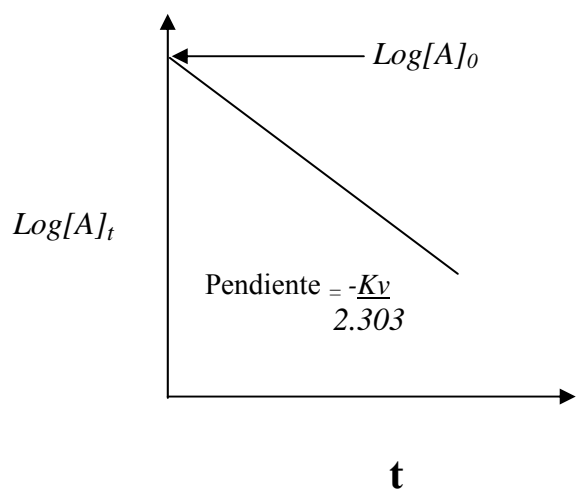


Fig. No.2 Gráfica de resultados para ver si la reacción es de primer orden

Los métodos que se utilizan para determinar la concentración de una de las especies químicas son : Los métodos , químicos y los métodos físicos . ⁷

En los métodos físicos por ser los más exactos se mide una propiedad física relacionada con la concentración , por ejemplo , si se usa un espectrofotómetro se estaría midiendo la absorbancia de la solución, de tal manera que de acuerdo a la ley de Beer la absorbancia de la solución es directamente proporcional a la concentración y la ecuación (6) se puede escribir en la forma

$$\log A_t = \log A_0 - \frac{K_v \cdot t}{2.303} \quad (7)$$

Así , una gráfica de logaritmo de la absorbancia frente al tiempo da una gráfica similar a la figura 2 , lo cual permite de igual manera calcular K_v de la pendiente.

D.-Vida media.

Para una reacción dada, la vida media $t_{1/2}$ de un reactivo en particular es el tiempo necesario para que su concentración alcance un valor intermedio entre sus valores inicial y final.

El valor de la vida media siempre es inversamente proporcional a la constante de velocidad y en general depende de las concentraciones de los reactivos.^{4,7}

Para una reacción de primer orden, la ecuación de velocidad es la (6), escrita en logaritmo natural, toma la forma.

$$\ln \frac{[A]_0}{[A]_t} = K_v \cdot t$$

La vida media se obtiene igualando $[A]_t$, a $[A]_{0/2}$ y t a $t_{1/2}$:

y por lo tanto,

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{K_v} = \frac{0.693}{K_v} \quad (8)$$

Para este caso la vida media es independiente de la concentración inicial. Como en una reacción de primer orden solo hay un reactivo, la vida media del reactivo también puede considerarse como vida media de la reacción.

E.- Dependencia de la Velocidad de reacción con la Temperatura.

El efecto de la temperatura en las velocidades de las reacciones químicas es de gran importancia práctica como teórica. Cuando se lleva a cabo una reacción química la selección de la temperatura debe ser la apropiada para determinar el rendimiento de la reacción.

Se encontró experimentalmente que la constante de velocidad K_v varía con la temperatura de acuerdo con la relación

$$\text{Log}_{10} K_v = b - \frac{a}{T} \quad (9)$$

Donde a y b son constantes y T es la temperatura absoluta o termodinámica. Van't Hoff. Y Arrhenius encontraron la relación entre la constante de equilibrio y la temperatura conocida como isócora de Van' t Hoff. ⁷

$$\frac{d \ln K_c}{dT} = \frac{\Delta E}{RT^2} \quad (10)$$

Donde ΔE es la energía interna de los productos menos la de los reactivos. Basándose en estos conceptos, S. Arrhenius 1889 sugirió que una ecuación más razonable para una constante de velocidad K_v sería:

$$\frac{d \ln K_v}{dT} = \frac{E_a}{RT^2} \quad (11)$$

El parámetro E_a se llama energía de activación de la reacción. Si E_a no depende de la temperatura la ecuación anterior al integrarse da:

$$\ln K_v = -\frac{E_a}{RT} + \ln A \quad (12)$$

Donde A es la constante de integración.

La ecuación (12) expresada en forma exponencial, más tarde fue transformada por Arrhenius ⁷

En:

$$K_v = A e^{\frac{-E_a}{RT}} \quad (13)$$

Donde A es el factor de frecuencia o pre exponencial. Esta ecuación puede interpretarse que a temperatura constante y entre mayor sea la energía de activación más pequeña será la constante de velocidad y por lo tanto más lenta la reacción.

Por otro lado, se supone que todas las reacciones son el resultado de choques entre las moléculas. Sin embargo, Arrhenius supone que para que una reacción tenga lugar, se requiere una orientación adecuada de las moléculas, una activación de las moléculas antes que reaccione o, que es lo mismo que las moléculas adquieran un estado excepcionalmente alto de energía. ^{3,7}

De esto se concluye que de todas las colisiones entre las moléculas de reacción sólo una fracción da lugar a que ocurra una reacción. Por lo tanto, la energía de activación, E_a , se define como la energía mínima necesaria para que ocurra la reacción. Las unidades de la E_a son las mismas que la R, es decir, energía por mol o J/mol. La energía de Arrhenius se puede escribir en forma logarítmica. ^{3,5,7}

$$\ln K_v = \ln A - \frac{E_a}{RT} \quad (14)$$

ó en logaritmo base 10

$$\log K_v = \log A - \frac{E_a}{2.303RT} \quad (15)$$

Una representación gráfica de $\text{Log } K_v$ frente al recíproco de la temperatura, $1/T$, ha de dar una línea recta de pendiente igual a $-E_a/2.303R$ y ordenada en el origen igual a $\text{Log } A$, como se muestra en la Fig No. 3

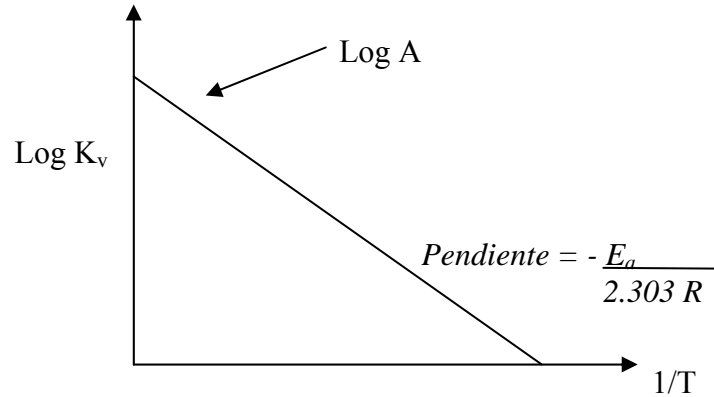


Fig No. 3 Gráfica de Arrhenius.

La experiencia muestra que la velocidad y la constante de velocidad de una reacción dependen de la temperatura. La ecuación de ARRHENIUS establece que la constante de velocidad K_v de reacción química varía con la temperatura absoluta T , de acuerdo con la siguiente ecuación .⁷

$$\ln K_v = -\frac{E_a}{RT} + \text{Constante} \quad (16)$$

El tiempo requerido para que se complete una reacción es inversamente proporcional a K_v , es decir

$$t \propto \frac{1}{K_v}$$

Introduciendo un término constante para eliminar la proporcionalidad, se obtiene

$$t = \text{Constante} \cdot \frac{1}{K_v}$$

Tomando logaritmo natural a ambos miembros de esta expresión, obtenemos

$$\ln t = - \ln K_v + Constante \quad (17)$$

Sustituyendo la ecuación (16) en la (17), se obtiene

$$\ln t = \frac{E_a}{RT} + Constante \quad (18)$$

ó usando logaritmo en base 10 , tenemos

$$\text{Log} t = \frac{E_a}{2.303 RT} \quad (19)$$

De manera que sí el tiempo para que suceda una reacción dada se mide a varias temperaturas, la energía de activación puede encontrarse graficando $\log t$ frente a $1/T$ y de pendiente de la recta que es igual a $E_a / 2.303 R$, se calcula E_a .⁷

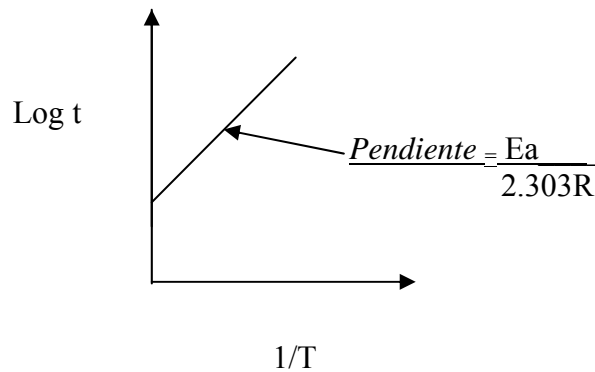


Fig No. 4 Gráfica para calcular la energía de activación.

II.- Parte Experimental.

A.- Material Utilizado:

A₁. - Reactivos:

1. Rojo de metilo.
2. Bromuro de Potasio.
3. Bromato de Potasio.
4. Ácido Sulfúrico.
5. Agua destilada.
6. Alcohol Etilico al 95%

A₂.- Equipos:

Espectrofotómetro UV-modelo 1203 (Shimadzu Europa GMBH)

1. Espectrofotómetro UV (Cecil 1000 Seres)
2. Termostato marca SBSS Modelo BT-9 Serie B (baño María)
3. Balanza marca OHAUS.
4. Cronómetro Q&Q.
5. PHmetro marca HACH
6. Probeta 10 y 25 ml.
7. Pipeta volumétrica de 10ml.
8. Tubos de ensayo grande.
9. Termómetro -10 a150 C
10. Celda referencia.
11. Beaker de 40 ml y 500 ml.
12. Pizeta.
13. Espátula.
14. Matraz aforado de 100 y 1000ml
15. Micropipeta de 0.1 a 1 ml

B.- Procedimiento

B₁.-Preparación de los reactivos.

Solución de Rojo de Metilo al 0.01%.

Se pesó con exactitud 0.01 grs del indicador rojo de metilo y se introdujo dentro de un matraz aforado de 100 ml y se aforó en una mezcla de disolvente, etanol: agua (1:9)

Bromuro de Potasio/Bromato de Potasio mezcla al 0.05M

Se preparó bromuro de potasio 0.0833 M en el disolvente etanol: agua (1:9) y bromato de potasio 0.0167 M en el disolvente etanol: agua (1:9). Estas soluciones se mezclaron para tener una concentración total de bromo de 0.05 M.

Ácido Sulfúrico 0.05 M

Se midió con exactitud 0.277ml de ácido sulfúrico al 96% w/w y se introdujo en un matraz de 100ml en agua destilada.

Preparación del blanco.

Se midieron 10ml de alcohol etílico y se introdujeron en matraz aforado de 100ml y se aforó con agua destilada para obtener una solución en proporción 1: 9.

B₂- Determinación de la Energía de activación (E_a)

1. Con una pipeta volumétrica se midió 10 ml de la solución de rojo de metilo al 0.01% y se transfirió a un tubo de ensayo grande.
2. Se agregó al tubo de ensayo grande 10ml de la mezcla (Br/BrO₃) 0.05M .
3. Se añadió a otro tubo de ensayo grande 5 ml de ácido sulfúrico 0.05M.
4. Se introdujeron los dos tubos de ensayo dentro de un beaker grande con agua y se colocaron en un termostato a 30°C.
5. Una vez que la temperatura se ha alcanzado, se procede a mezclar rápidamente y se midió el tiempo que tarda la solución en decolorarse.
6. Se repiten los pasos del 1 al 5 para cada una de las temperaturas 30, 40,50 60,70 y 80°C.
7. Se realizaron cuatro mediciones para cada muestra.

B₃.-Determinación espectroscópica de la constante de velocidad (K_v)

- 1.- En una cubeta de un espectrofotómetro se coloca la solución de rojo de metilo, (Br/BrO₃) y H₂ SO₄.
- 2.- Se lee la absorbancia a 520nm cada minuto hasta que la solución se decolora. ^{10,11}
- 3.- Las lecturas de absorbancia se hicieron a 30°C.

III.- Resultados.

Tabla No.1

Tiempo de decoloración de las muestras del rojo de metilo a diferentes temperaturas.

TEMPERATURA		TIEMPO EN [MIN]				
T °C	1/T *10 e ⁻³ K ⁻¹	Muestra 1	Muestra 2	Muestra 3	Muestra 4	Promedio
30°C	3.300	6.090	6.088	6.090	6.090	6.089
40°C	3.195	3.505	3.520	3.510	3.510	3.511
50°C	3.096	1.447	1.445	1.447	1.449	1.447
60°C	3.003	0.840	0.835	0.850	0.840	0.841
70° C	2.915	0.540	0.540	0.530	0.535	0.536
80° C	2.832	0.200	0.200	0.200	0.200	0.200

Los resultados presentados de las lecturas del tiempo de decoloración, fueron promediados y se les aplicó logaritmo base 10. Los valores obtenidos se muestran en la tabla No.2

Tabla No. 2

Valores del inverso de las temperaturas y del logaritmo en base 10 del tiempo.

1/T *10 e ⁻³ K ⁻¹	Log t (min)
2.832	- 0.6990
2.915	- 0.2707
3.003	- 0.0751
3.096	0.1605
3.195	0.5455
3.300	0.7846

En la figura No. 5 se muestran la representación gráfica de los resultados obtenidos en la Tabla No.2

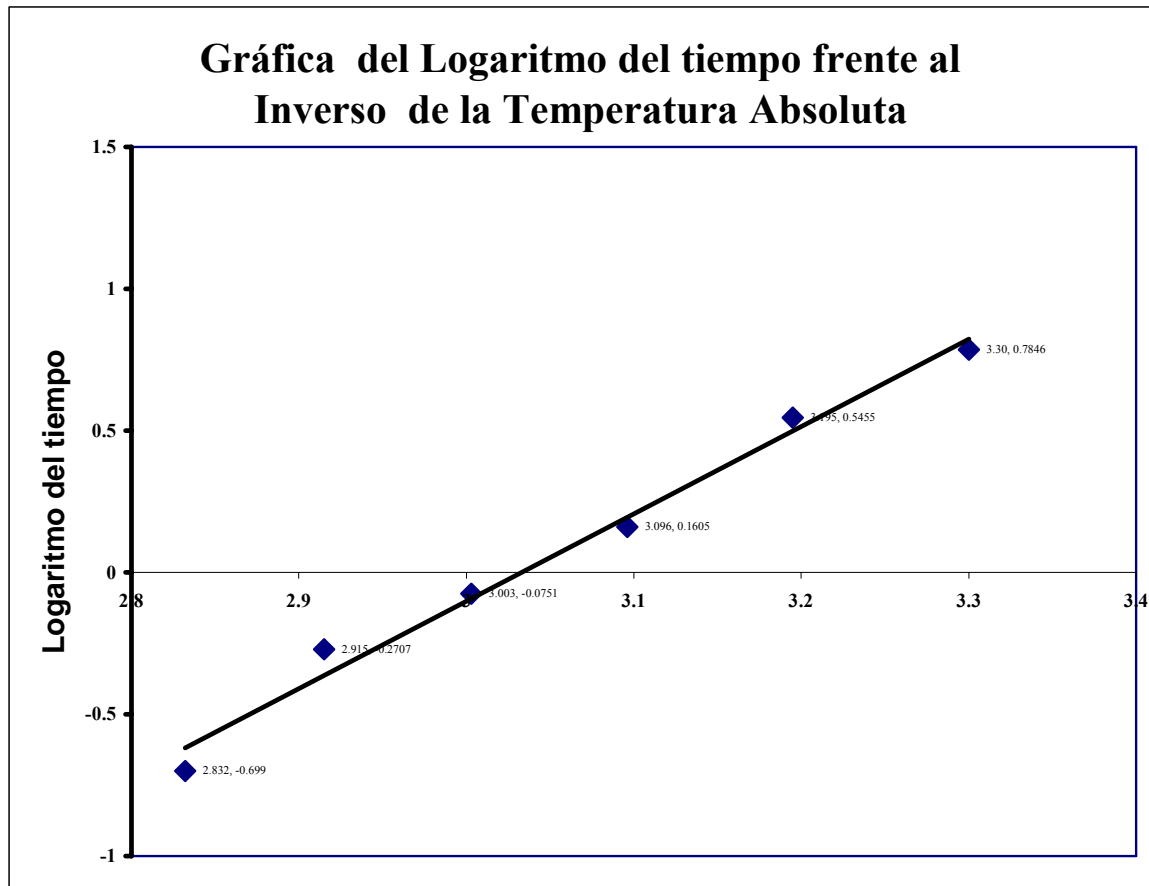


Fig. No. 5 Gráfica del logaritmo base 10 del tiempo frente al inverso de la temperatura.

La línea recta que se obtuvo en la figura No. 5 se expresa como:

$$Y = b_0 + b_1 X$$

Donde Y: Variable, dependiente.
X: Variable independiente.
 b_0 : Intercepto.
 b_1 : Pendiente.

De los datos resultantes se obtuvieron los coeficientes de determinación y del modelo lineal:

$$b_0 = -9.3371, b_1 = 3.07882, r^2 = 0.9864, r = 0.9931$$

De la figura No. 5 y haciendo uso de la ecuación (17) se calculo la energía de activación;

esto es

$$\text{Log } t = \frac{Ea}{2.303RT}$$

donde

$$\text{Pendiente} = \frac{Ea}{2.303 * R}$$

$$\text{Pendiente} = b_1 = 3.07882$$

$$R = 8.314 \text{ J/ mol } ^\circ\text{K}$$

$$\boxed{Ea = 3.07882 * 2.303 * 8.314 \text{ J/ mol K} = 58.95 \text{ J/ mol K}}$$

En la tabla No.3 se muestran los resultados de las lecturas. El tiempo a las distintas temperaturas con datos ajustados.

Tabla No. 3

Valores del inverso de las temperaturas y del logaritmo base 10 del tiempo.

$1 / T * 10^{-3} \text{ K}^{-1}$	Log t (min)
2.832	- 0.6180
2.915	- 0.3624
3.003	- 0.0915
3.096	0.1949
3.195	0.4996
3.300	0.8229

En la figura No. 6 se muestra la gráfica del logaritmo base 10 del tiempo contra el inverso de la temperatura con datos ajustados según la ecuación:

$$\text{Log}t = -9.3371 + 3.07882 * (1/T)$$

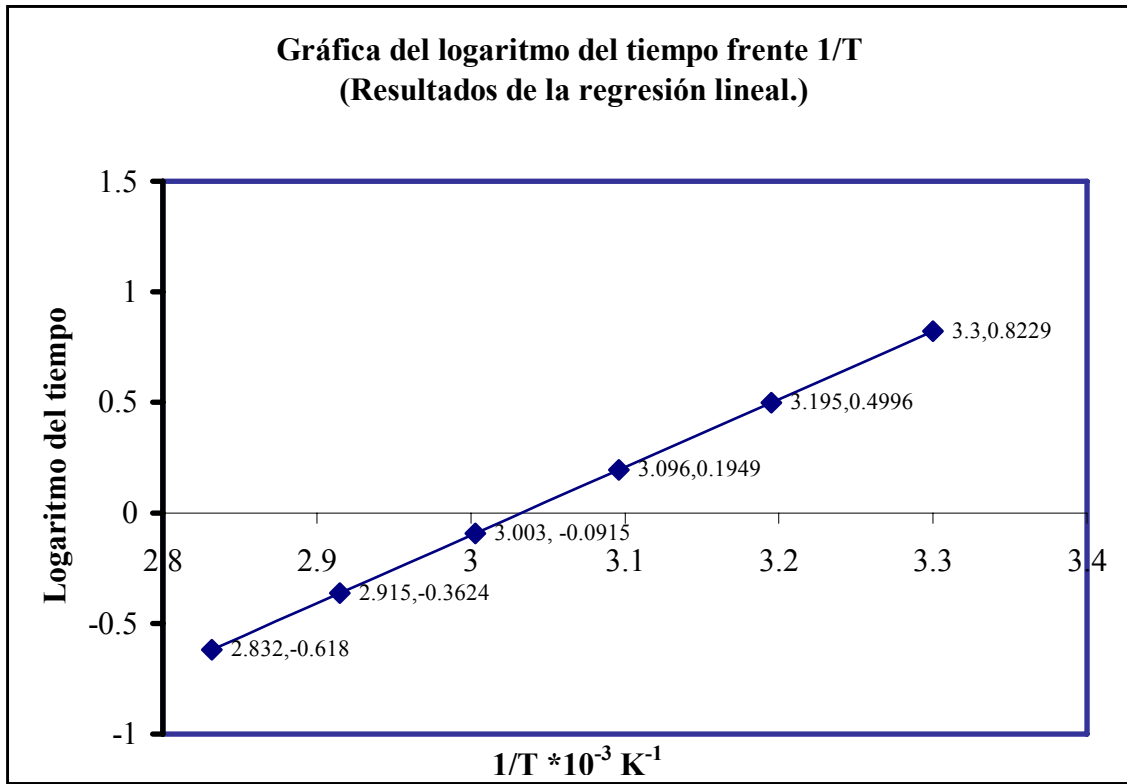


Figura No. 6 Gráfica de log t frente 1/T (Resultado de la regresión lineal simple.)

En la tabla No. 4 se muestran los valores obtenidos de las absorbancias para tres muestras estudiadas a intervalos de un minuto de tiempo.

Tabla No.4

Valores de Lecturas de Absorbancia de las muestras estudiadas, composición: (90:10) (Agua /ETOH) a Temperatura de 30°C.

Muestra	ABSORBANCIA					
	1 Min	2 Min	3 Min	4 Min	5 Min	6 Min.
I	0.480	0.407	0.266	0.129	0.038	0.020
II	0.483	0.411	0.270	0.128	0.040	0.022
III	0.483	0.409	0.268	0.127	0.042	0.024
Promedio	0.482	0.409	0.268	0.128	0.040	0.022

Los resultados presentados en la tabla No. 4 se promediaron, se les aplicó logaritmo base 10, obteniéndose los resultados mostrados en la tabla No. 5

Tabla No.5

Valores del tiempo y el logaritmo base 10 del promedio de la absorbancia.

TIEMPO	Log A
1	-0.317
2	-0.388
3	-0.572
4	-0.893
5	-1.398
6	-1.657

En la figura No. 7 se puede observar el comportamiento de la absorbancia en la medida, que transcurre el tiempo.

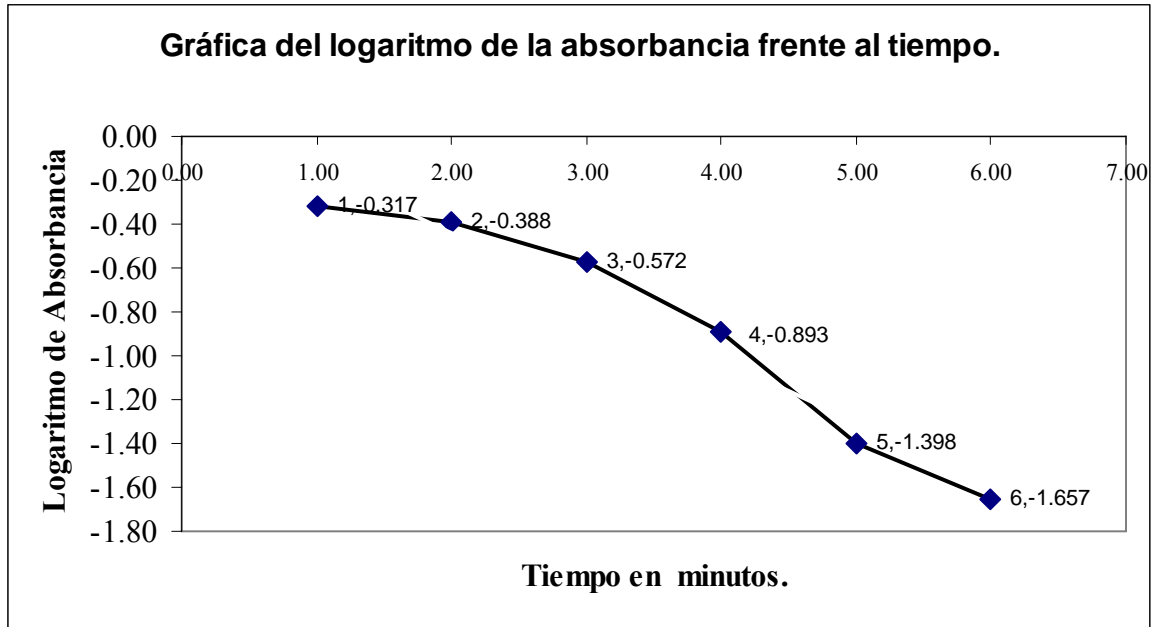


Fig. No.7 Gráfica del Logaritmo de la absorbancia frente al tiempo.

La gráfica anterior se realizó con los datos experimentales, al realizarle un tratamiento estadístico a los datos se encontró el coeficiente de determinación y el coeficiente del modelo lineal.

$$r^2 = 0.9459, r = 0.9726, b_1 = -0.2871, b_0 = 0.1342$$

Al aplicarle un ajuste de correlación a los datos anteriores se obtuvieron los siguientes datos con la siguiente ecuación: (Véase la Tabla No.6)

Tabla No.6

Absorbancia	Logaritmo A	Tiempo en minutos
0.7031	-0.1529	1.0
0.3630	-0.4400	2.0
0.1866	-0.7288	3.0
0.096	-1.0144	4.0
0.049	-1.3015	5.0
0.025	-1.5887	6.0

REPRESENTACIÓN GRÁFICA DEL LOGARITMO BASE 10 DE LA ABSORBANCIA FRENTE AL TIEMPO DEL ROJO DE METILO. COMPOSICIÓN (10:90) ETOH/H₂O. T=30^oC $\lambda = 520nm$

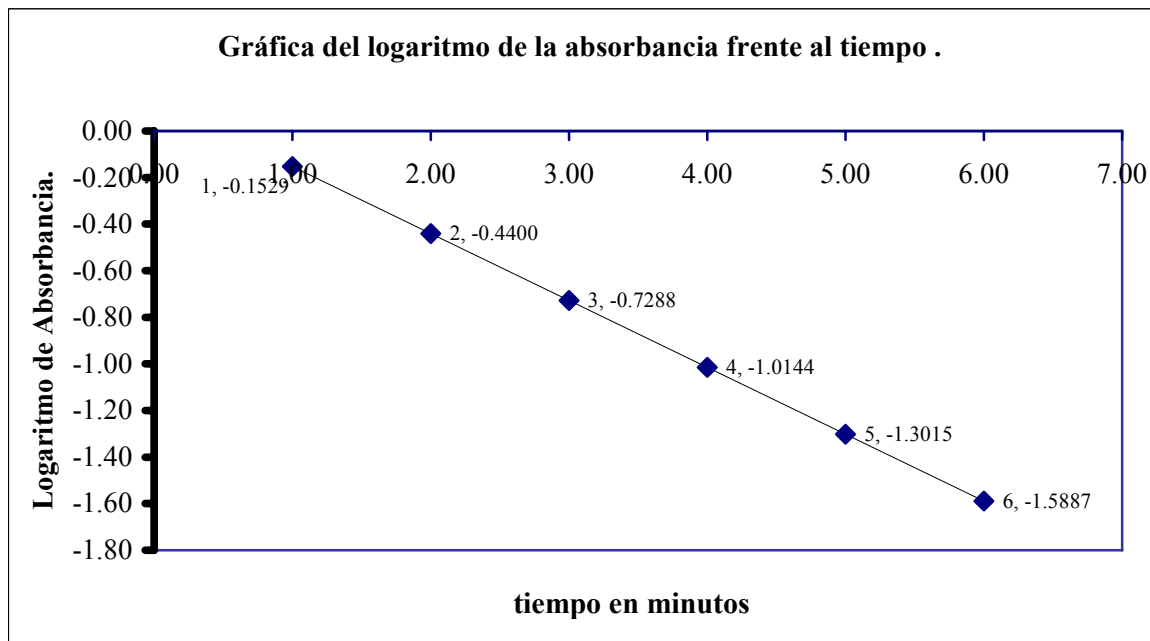


Fig. No. 8 Gráfica del logaritmo de la absorbancia frente al tiempo . Datos ajustados según la ecuación:

$$\boxed{\text{Log}A = 0.1342 - 0.2871 * (t)}$$

En la Figura No. 8 la pendiente de la recta resultó negativa, la reacción de bromación del rojo de metilo es una reacción de Pseudo primer Orden.

Los valores de regresión lineal obtenidos de la tabla No.5 fueron:

$$r^2=0.9726, r=0.9459, b_1 = -0.2871, b_0 = 0.1342$$

Haciendo uso de la ecuación (7) se calculo el valor de la constante de velocidad K_v , resultando.

$$K_v = -2.303 \cdot \text{pendiente}$$

$$K_v = (-2.303) \cdot (-0.2871) = 6.60 \times 10^{-1} \text{ min}^{-1}$$

El valor de la Vida media, se obtiene en base a la ecuación (8)

$$t_{1/2} = \ln 2 / 6.6 \times 10^{-1} \text{ min}^{-1} = 1.05 \text{ min.}$$

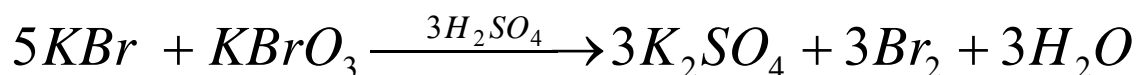
Estos resultados corresponden a una reacción rápida de Pseudo primer orden.

IV.- Discusión de los Resultados.

REACCIÓN PRINCIPAL DE BROMACIÓN DEL ROJO DE METILO.

La reacción principal de bromación que es motivo de estudio se llevo a cabo utilizando las sales de potasio del bromo como agentes bromantes en medio ácido en condiciones ambientales, en donde la reacción principal es de **sustitución electrofílica aromática**.

PREPARACIÓN DEL AGENTE BROMANTE (Br/BrO3)



En cuanto al valor de la Energía de Activación $E_a = 58.95 \text{ J/mol } ^\circ\text{K}$ encontrado experimentalmente, para la bromación del rojo metilo, fué considerado a partir de la tabla No.2 y gráfica No.5. La gráfica obtenida resultó de pendiente positiva, por el cual este valor nos indica que entre menor es el valor de la Energía de Activación la formación de los productos se vio favorecida y por consiguiente la constante de la velocidad K_v se considera mayor con respecto estimado según la literatura.

Los resultados obtenidos en la tabla No.4 y gráfica No.8 muestran que en la medida que aumenta el tiempo de bromación del rojo de metilo la absorbancia disminuye . Este probablemente se debe a que la reacción del rojo de metilo y el bromo involucra la competencia entre la sustitución en el anillo aromático y el enlace azo, predominando la sustitución en el anillo.

Se hizo la representación gráfica No.7 del logaritmo de la absorbancia frente al tiempo, para determinar el orden de reacción que sigue la bromación del rojo de metilo. La gráfica resulto una recta de pendiente negativa, lo cual nos indica que la reacción es de pseudo primer orden ya que el bromo esta en exceso con respecto al rojo de metilo. El valor de la constante velocidad es de $6.6 \times 10^{-1} \text{ min}^{-1}$.

También se calculó el tiempo de vida media y el valor fue de 1.05 min.

La literatura reporta que el rango de $t_{1/2}$ para las reacciones rápidas es $10^2 - 10^{-1}$ de seg. El valor de $t_{1/2}$ para este trabajo es de 6.3×10^1 seg. Por lo tanto, la reacción de bromación del rojo metilo es una reacción rápida.

V.- Conclusión.

En el presente trabajo y a través de un método sencillo se logró seguir la cinética de bromación del indicador rojo de metilo.

Por el método gráfico se calculó experimentalmente la energía de activación del rojo de metilo.

Se determinó la constante de velocidad para la reacción a temperatura ambiente 30° C.

De acuerdo al gráfico que se obtuvo del logaritmo de la absorbancia frente al tiempo se confirmó que la reacción de bromación del indicador rojo de metilo es de pseudo primer orden.

Finalmente, se calculó el tiempo de vida media para verificar la rapidez de la reacción.

VI.-REFERENCIAS.

- 1.- CLERK, ENCICLOPEDIA QUÍMICA INDUSTRIAL, INDICADORES PAG. 747.
- 2.- ARTHUR A. FRIST AND RALPH G. PEARSON, KINETICS AND MECHANISMO, SECOND EDITION, JOHN WILEY & SONS, INC, 1961.
- 3.- Ira. N. LEVINE, FISICO QUÍMICA, TERCERA EDICIÓN, Mc GREAW – HILL, INTERAMERICANA, S.A. 1991.
- 4.- J. E. SEQUEIRA, FOLLETO DE CINÉTICA QUÍMICA, UNAN, LEON, 1995.
- 5.- SAMUEL GLASSTONE, TRATADO DE FISICO QUÍMICA, EDICIÓN PUEBLO Y EDUCACIÓN, 1976.
- 6.- E. TREJOS, FOLLETO DE QUÍMICA ANALÍTICA, UNAN, LEON, 1994.
- 7.- II. E. AVERY, CINETICA QUÍMICA BASICA Y MECANISMO DE REACCION, EDITORIAL REVERTE, S.A. 1977.
- 8.- T.W. GRAHAM SOLOMONS, ORGANIC CHEMISTRY, FIFTH EDITION, EDITORIAL LIMUSA, S.A. 1991.
- 9.- STEPHEN W. TOBEY THE ACID DISSOCIATION CONSTANT OF METHYL RED. JOURNAL OF CHEMICAL ,EDUCATION OCTUBRE VOL. 35, No.10 PAGE 514 –515, 1958.
- 10.-KOLTHOFF ,I.M., ACID – BASE INDICATOR II EDITION THE MACMILLAN COMPANY, NEW YORK , PAGE 145 –146 , 1953.
- 11.-DELGADO CAMPOS GIOVANI, MONOGRAFÍA : DETERMINACION ESPECTROFOTOMETRICA DEL PKA DEL ROJO DE METILO Y ROJO DE ALIZARINA. 1971.
- 12.- H. A. BENNESI AND J. H. HILDEBRAND, J. Am. Chem Soc, 71: 2703 (1,949)
- 13.- INDEX MERK REAGENTS – DIAGNOSTICS CHEMICALS 1990- 1991.

ANEXOS

análisis de Regresión - modelo lineal: $Y = a + b \cdot X$

variable dependiente: log t (min)
 variable Independiente: $1/T \cdot 10^{-3}$ (K)

Parameter	Estimate	Standard Error	T Statistic	P-Value
Intercepto	-9.33713	0.552765	-16.8917	0.0001
Pendiente	3.07882	0.180582	17.0494	0.0001

Análisis de Varianza.

Source	Sum of Squares	Df	Mean Square	F-Ratio	P-Value
Model	1.45333	1	1.45333	290.68	0.0001
Residual	0.0199989	4	0.00499973		
Total (Corr.)	1.47332	5			

Coefficiente de correlación = 0.99319
 R-cuadrado = 98.6426 percent
 Standard Error of Est. = 0.0707088

The StatAdvisor

The output shows the results of fitting a linear model to describe the relationship between log t and 1/T. The equation of the fitted model is

$$\text{Log } t = -9.33713 + 3.07882 \cdot (1/T)$$

Since the P-value in the ANOVA table is less than 0.01, there is a statistically significant relationship between log t and 1/T at the 99% confidence level.

The R-Squared statistic indicates that the model as fitted explains 98.6426% of the variability in log t. The correlation coefficient equals 0.99319, indicating a relatively strong relationship between the variables. The standard error of the estimate shows the standard deviation of the residuals to be 0.0707088. This value can be used to construct prediction limits for new observations by selecting the forecasts option from the text menu.

Untitled (<untitled>)
8/1/2003 10:06 PM

Regression Analysis - Linear model: $Y = a + b \cdot X$

Dependent variable: Log A
Independent variable: Tiempo

Parameter	Estimate	Standard Error	T Statistic	P-Value
Intercept	0.134267	0.133645	1.00465	0.3719
Slope	-0.287171	0.0343168	-8.36825	0.0011

Analysis of Variance

Source	Sum of Squares	Df	Mean Square	F-Ratio	P-Value
Model	1.44318	1	1.44318	70.03	0.0011
Residual	0.0824348	4	0.0206087		
Total (Corr.)	1.52561	5			

Correlation Coefficient = -0.972608
R-squared = 94.5966 percent
Standard Error of Est. = 0.143557

The StatAdvisor

The output shows the results of fitting a linear model to describe the relationship between Log A and Tiempo. The equation of the fitted model is

$$\text{Log A} = 0.134267 - 0.287171 \cdot \text{Tiempo}$$

Since the P-value in the ANOVA table is less than 0.01, there is a statistically significant relationship between Log A and Tiempo at the 99% confidence level.

The R-Squared statistic indicates that the model as fitted explains 94.5966% of the variability in Log A. The correlation coefficient equals -0.972608, indicating a relatively strong relationship between the variables. The standard error of the estimate shows the standard deviation of the residuals to be 0.143557. This value can be used to construct prediction limits for new observations by selecting the forecasts option from the text menu.

Gráfica del Logaritmo del tiempo y el Inverso de la Temperatura Absoluta .

