

**ESTUDIO
CINÉTICO DE LA
REACCIÓN RELOJ
DE YODO CON
VITAMINA C**

Índice de contenidos

1. <u>Introducción</u>	4
2. <u>Cinética química</u>	6
2.1. <u>Velocidad de reacción</u>	6
2.1.1. <u>Velocidad mediana</u>	6
2.1.2. <u>Velocidad instantánea</u>	6
2.2. <u>Ecuación de velocidad o ley de velocidad</u>	7
2.3. <u>Factores que afectan la velocidad de reacción</u>	7
2.3.1. <u>Temperatura de reacción</u>	7
2.3.2. <u>Concentración de los reactivos</u>	8
2.3.3. <u>Catalizadores</u>	8
2.3.4. <u>Grado de división de los sólidos</u>	9
2.3.5. <u>Estado físico y naturaleza química</u>	9
2.3.6. <u>Presión</u>	9
2.4. <u>Mecanismos de reacción</u>	9
2.5. <u>Reacciones con período de inducción</u>	9
3. <u>Experimentación e investigación</u>	11
4. <u>Obtención y procesamiento de datos</u>	13
4.1. <u>Simulación mediante el programa Kintecus</u>	13
4.2. <u>Obtención de datos experimentales</u>	20
4.3. <u>Análisis de los datos obtenidos</u>	22
4.4. <u>Simulación de la reacción a partir de los datos obtenidos</u>	26
5. <u>Conclusión</u>	27
6. <u>Bibliografía</u>	28

1. Introducción

La elección del tema para llevar a cabo este trabajo no fue, ciertamente, fácil, ya que desde un principio sabía que quería realizar una investigación relacionada con la química, pero no tenía claro qué temática concreta de esta materia quería trabajar.

Después de sopesar distintas alternativas y descartar las que no eran factibles o ya se habían explotado, busqué en el libro de texto de la materia para ver si daba con alguna sugerencia y me interesó en gran manera la unidad introductoria de cinética química de éste, aunque aún no habíamos dado este temario en la asignatura de química porque se trataba de una de las últimas unidades del curso. Aún así, decidí que podría resultar interesante y que podría aprender mucho de ello. Una vez escogida la temática de forma general, decidí en qué reacción podría centrarme. La verdad es que no quería recurrir a ningún tipo de reacción que estuviese demasiado trabajada en este aspecto, sino que quería una reacción distinta y sorprendente. La reacción de Landolt o reacción reloj de yodo, que es la que escogí después de dar con una página web en la que se describen brevemente diez reacciones espectaculares¹, cumple justamente estos requisitos, ya que se trata de una reacción en la que desde la adición de los reactivos hasta la aparición de los productos tiene lugar un intervalo de tiempo concreto, de modo que inicialmente parece que no se lleva a cabo y después acontece repentinamente.

En primer lugar y al tratarse de un tema que se encuentra dentro de la química, me propuse ampliar mis conocimientos acerca de esta ciencia experimental, concretamente los que se encuentran dentro del apartado de la cinética química; así como practicar la efectuación de reacciones químicas en un laboratorio de química y llevar a cabo un trabajo de campo basado en la experimentación y la obtención de datos cuantitativos y cualitativos.

A continuación, cuando ya había decidido el tema que estudiaría, establecí ciertos objetivos concretos: estudiar la cinética de una reacción determinada, encontrar experimentalmente la ecuación de la velocidad y el orden en que reaccionan sus reactivos, que implica también hallar la constante de velocidad de la reacción; y, por último, observar la variación de la velocidad al modificar la concentración de reactivos específicos. Se podrían, por lo tanto, resumir en las siguientes cuestiones: ¿En qué medida influyen las concentraciones de los distintos reactivos en la velocidad de la reacción reloj de yodo con vitamina C?, ¿cuáles son el mecanismo de reacción y la ecuación de velocidad de la reacción reloj de yodo con vitamina C?

¹ <http://www.fogonazos.es/2008/03/diez-reacciones-de-la-materia-que-quiz.html> (Consultada el 14/06/2012)

Para esto, la monografía se organiza en una primera investigación conceptual para comprender la cinética química de esta reacción y en un estudio experimental y analítico de la reacción.

Esta temática me llamó la atención debido a que la cinética química tiene muchas aplicaciones en el campo de la industria y el medio ambiente, así como en la conservación de los alimentos y la industria cosmética. Pero además, es fundamental en la refinación del petróleo y en la síntesis de productos básicos y productos farmacéuticos, entre otros². No solamente esto, sino que las reacciones reloj también son vitales para regular procesos biológicos, tal y como sucede también con las reacciones oscilantes³. De este modo, es un tema que, aunque se pueda considerar mayoritariamente teórico, realmente tiene una gran relevancia en nuestro día a día y en la sociedad actual.

² Fuente: <http://es.scribd.com/doc/81684634/Aplicaciones-Cinetica-Quimica> (Consultada el 11/10/12.)

³ “Este tipo de reacciones son muy utilizadas en el estudio de la cinética de las reacciones químicas. Al igual que en el caso de las reacciones oscilantes, también intervienen en la regulación de muchos procesos biológicos. “
Fuente: <http://www10.uniovi.es/Semanacyt2009/experimentando/luzycolor/reloj.html> (Consultada el 11/10/12)

2. Cinética química

La cinética química consiste en la parte de la química que estudia el mecanismo, la velocidad de las reacciones y los factores que influyen en dicha velocidad. Una de sus utilidades reside en la industria química ya que gracias a la cinética se puede conocer como acelerar o ralentizar un proceso químico, así como determinar la rentabilidad y viabilidad de éste.

2.1. Velocidad de reacción

La velocidad de reacción se define como la rapidez en que se produce la transformación de los reactivos o sustancias iniciales en productos o sustancias finales, es decir, consiste en la cantidad de reactivo consumida o cantidad de producto formada por unidad de tiempo. A su vez, este concepto puede dividirse en los siguientes:

2.1.1. Velocidad mediana

Se puede expresar como la disminución de la concentración de un reactivo o el aumento de la concentración de un producto entre un intervalo de tiempo. La unidad de la velocidad es moles por litro segundo ($\text{mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$). Por lo tanto, si disponemos de la siguiente reacción:
 $a A + b B \rightarrow c C + d D$

La velocidad puede expresarse como $\frac{\Delta[A]}{\Delta t}$ y $\frac{\Delta[B]}{\Delta t}$

o como $\frac{\Delta[C]}{\Delta t}$ y $\frac{\Delta[D]}{\Delta t}$.

A y B: Reactivos.
a y b: Coeficientes estequiométricos de los reactivos.
C y D: Productos.

Para que las expresiones de la velocidad mediana sean equivalentes, es necesario que cada una de ellas se divida por su coeficiente estequiométrico correspondiente, así como también indicar las variaciones de los reactivos en negativo, ya que disminuyen, y la variación de los productos en positivo; tal y como se muestra a continuación:

$$\text{Velocidad mediana} = \frac{-\Delta[A]}{a \Delta t} = \frac{-\Delta[B]}{b \Delta t} = \frac{\Delta[C]}{c \Delta t} = \frac{\Delta[D]}{d \Delta t}$$

2.1.2. Velocidad instantánea

Además de la velocidad mediana, es posible calcular la velocidad instantánea, es decir, en un instante determinado. Esto es posible derivando la concentración de un reactivo o producto respecto al tiempo y dividiéndola por su coeficiente estequiométrico con el signo correspondiente, dependiendo de si se trata de un reactivo o un producto; ya que de este

modo consideramos un intervalo de tiempo que tiende a cero y que, por lo tanto, es prácticamente insignificante. Considerando la reacción hipotética utilizada en el apartado anterior, se puede expresar la velocidad instantánea del siguiente modo:

$$\text{Velocidad instantánea} = \frac{-1}{a} \frac{d[A]}{dt} = \frac{-1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{c} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{d} \frac{d[D]}{dt}$$

2.2. Ecuación de velocidad o ley de velocidad

Esta expresión relaciona la velocidad de la reacción con las concentraciones de las sustancias que reaccionan a una temperatura concreta. Para un gran número de reacciones como la considerada en el apartado anterior, la ecuación de velocidad es la siguiente, aunque no es la misma en reacciones más complejas porque estas dependerán de su mecanismo de reacción:

$$v = k[A]^m[B]^n$$

$$y = m + n$$

v: Velocidad ($\text{mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$).
k = Constante de velocidad de la reacción (Unidades según el orden de la reacción).
[A] y [B]: Concentraciones de los reactivos A y B, respectivamente ($\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$).
m = orden de reacción respecto al reactivo A.
n = orden de reacción respecto al reactivo B.
y = Orden global de la reacción.

En reacciones elementales, los órdenes de reacción respecto a cada reactivo corresponden con su coeficiente estequiométrico y el orden global coincide con su molecularidad⁴.

2.3. Factores que afectan la velocidad de reacción

Hay ciertos factores que influyen en la rapidez a la que tiene lugar una reacción, de modo que se tienen en cuenta si interesa que una reacción se produzca más rápidamente o más lentamente.

2.3.1. Temperatura de reacción

Generalmente, al elevar la temperatura se aumenta también la velocidad de reacción, ya que la temperatura aumenta la energía cinética de sus partículas, que por consiguiente incrementa la cantidad de colisiones de las partículas de los reactivos.

⁴ **Molecularidad:** Número de átomos, moléculas o iones que intervienen simultáneamente en una reacción. [Fuente: COSTA, J. M. "Molecularidad". *Diccionario De Química Física*. Madrid: Díaz De Santos, 2005. 381-382.]

La expresión matemática que relaciona la constante de velocidad con la temperatura fue propuesta por el químico Svante Arrhenius⁵ y expone lo siguiente:

$$k = A e^{\frac{-E_a}{RT}}$$

A = Factor de frecuencia de las colisiones (tiene las mismas unidades que k).

E_a = Energía de activación ($\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$), que se trata de la barrera de energía mínima que deben sobrepasar los reactivos para pasar a productos.

e = Número e o número de Euler (adimensional).

R = Constante de los gases ideales ($R = 8,314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$).

T = Temperatura absoluta (Kelvin).

2.3.2. Concentración de los reactivos

Un aumento de la concentración de los reactivos generalmente resulta en un aumento de la velocidad de reacción, ya que al aumentar el número de partículas se produce un número mayor de colisiones entre dichas partículas, que es una condición fundamental para que reaccionen unas especies químicas.

2.3.3. Catalizadores

Son sustancias que modifican la energía de activación en reacciones químicas, de modo que hacen aumentar o disminuir la velocidad de una reacción y pueden recuperarse inalteradas al finalizar el proceso. Los catalizadores no constan en la ecuación estequiométrica.

Los catalizadores positivos aumentan la velocidad, y son los de más interés debido a la gran cantidad de utilidades que poseen. Por ejemplo, los enzimas son catalizadores que dirigen las reacciones metabólicas, es decir, normalmente permiten que se produzcan reacciones sin que sea necesario aumentar demasiado la temperatura corporal para conseguir la energía de activación de cada reacción.

Por otra parte, las sustancias que disminuyen la velocidad de una reacción son los catalizadores negativos. Para ejemplificar, los agentes de conservación alimentaria son catalizadores negativos que preservan las características de los alimentos inhibiendo ciertas reacciones no deseadas.

⁵ **Svante Arrhenius: (1859-1927).** Químico y físico sueco que obtuvo el premio Nobel de Química en 1903 gracias a su teoría de la disociación electrolítica.. [Fuente: SALVAT, JUAN. "Arrhenius, Svante August." *Diccionario Enciclopédico Salvat*. Vol. 3. Barcelona: Salvat Editores, 1989.]

2.3.4. Grado de división de los sólidos

Si se aumenta el grado de división de las partículas, la superficie de contacto también crece, así que la probabilidad de choques entre moléculas es mayor y aumenta la velocidad de reacción.

2.3.5. Estado físico y naturaleza química

La naturaleza química propia de cada sustancia influye en su velocidad, ya sea por el tipo de sustancia o por la cantidad de enlaces que se deben romper. El estado físico de sus reactivos también es otro factor condicionante, por ejemplo, las reacciones sólidas acontecen más lentamente que las reacciones homogéneas entre gases o entre sustancias disueltas.

2.3.6. Presión

Mayoritariamente, si se aumenta la presión en las reacciones gaseosas la velocidad también aumentará, ya que la elevación de la presión significa que el volumen del gas se reduce y la concentración del gas crece.

2.4. *Mecanismos de reacción*

Se trata de la totalidad de las reacciones elementales, que son cada una de las fases intermedias de la reacción química y que corresponden a la ecuación de velocidad de la reacción. La suma de las reacciones elementales se llama reacción global.

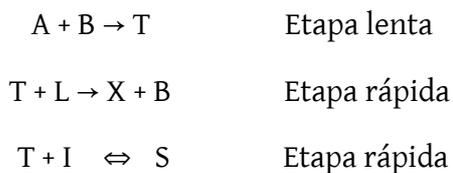
La velocidad de la reacción dependerá de la etapa elemental más lenta de la reacción, que es conocida como etapa determinante.

2.5. *Reacciones con período de inducción*

Las reacciones con período de inducción o reacciones reloj son aquellas en que después de ser activadas, hay un período de inducción en que la reacción parece que no se lleva a cabo y después se produce un cambio repentino.

El mecanismo de estas reacciones puede separarse en tres etapas⁶:

⁶ Fuente: SHAKHASHIRI, BASSAM Z. "Chapter 10: Clock Reactions." *Chemical Demonstrations: A Handbook for Teachers of Chemistry*. Vol. 4. Madison: University of Wisconsin, 1989. Pág. 6. Edición virtual.



A, B, I y L: Reactivos iniciales.
L: Reactivo limitante ($C_6H_8O_6$).
I: Indicador (almidón).

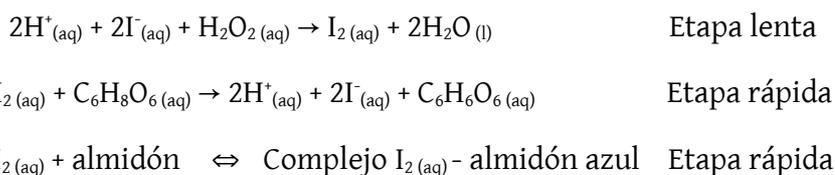
Al reaccionar A y B en la etapa lenta se forma el producto T, que reacciona en la segunda etapa con el reactivo limitante. Es característico de esta reacción que, en la segunda reacción, se vuelva a formar un reactivo inicial, el ión yoduro o reactivo B. A la vez, T se encuentra en equilibrio con I para formar S, que es justamente el producto responsable del cambio de color.

Mientras T reacciona con L, su concentración es tan baja que es incapaz de formar S, pero al agotarse todo el reactivo limitante entonces la concentración de T aumenta y reacciona con I para formar el producto que actúa como alarma.

3. Experimentación e investigación

Entre las distintas reacciones de Landolt que se pueden llevar a cabo, decidí escoger la que utiliza la vitamina C o ácido ascórbico para proporcionar el medio ácido debido a que es una de las más sencillas de realizar y se puede poner en práctica en un ámbito doméstico. Además, utiliza productos que no son tóxicos.

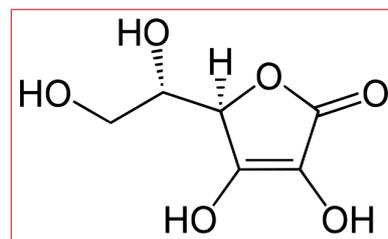
Esta reacción consta de tres etapas⁷:



El método experimental utilizado ha sido adaptado para poder reducir el máximo error posible, ya que considero que el uso de instrumentos más precisos y de laboratorio, siempre y cuando sea posible, puede ayudar a evitar causas de error comunes y así es más sencillo obtener datos coherentes.

El material necesario es el siguiente:

- Cuatro vasos de precipitados de 100 mL (± 5 mL)
- Erlenmeyer de 100 mL (± 5 mL)
- Pipetas graduadas de 5,0, 10,0 y 25,0 mL ($\pm 0,1$ mL)
- Varilla de vidrio
- Cronómetro ($\pm 0,5$ s)
- Frasco lavador
- Propipeta
- Agua destilada
- Tintura de yodo (Composición por 100 mL: 2,0 g I₂, 2,5 g KI, etanol 50° c.s.)
- Almidón en solución (1%)
- Peróxido de hidrógeno (3% masa/volumen)
- Comprimidos efervescentes de Vitamina C "Redoxon"⁸ (C₆H₈O₆)



Fórmula estructural C₆H₈O₆. [Fuente: http://commons.wikimedia.org/wiki/File:L-Ascorbic_acid.svg (Consultada el 15-02-2013)].

La selección de la vitamina C que se vende en farmacias frente al producto de laboratorio se debe a que es un producto de fácil obtención y que puede utilizarse en un ámbito doméstico

⁷ Fuente: WRIGHT, STEPHEN. W. "The Vitamin C Clock Reaction." *Journal of Chemical Education*, Vol. 79, No. 1. Enero 2002. págs. 40A-40B.

⁸ Composición por comprimido (4,5 g): 1000 mg ácido L-ascórbico, isomaltosa (E 953), ácido cítrico (E 330), bicarbonato sódico (E 500(ii)), carbonato sódico (E 500(i)), ácido málico (E 296), cloruro de sodio, aspartamo (E 951), acesulfamo K (E 950), aroma de naranja y beta-caroteno (E 160^a (ii)).

sin ninguna dificultad, aunque tenga más impurezas que el producto de laboratorio y no tengamos tantos datos sobre su composición. Cabe tener en cuenta que la vitamina C o ácido ascórbico se degrada con el paso del tiempo, de modo que hay que procurar que esto no ocurra o podría influir en los resultados de la investigación.

En primer lugar, se cogen 60,0 mL de agua destilada con la pipeta graduada y se vierten en un vaso de precipitados, el vaso A. En este vaso se añade un comprimido efervescente de Vitamina C de 1,00 g y se deja que se disuelva por completo.

El siguiente paso consiste en introducir 20,0 mL de agua destilada en el vaso de precipitados B y 20,0 mL en el vaso C y, mientras que en el B se verterá 1,0 mL del antiséptico tintura de yodo, en el otro se añadirán 10,0 mL de agua oxigenada y 1,0 mL de almidón en solución. Se debe mezclar antes el recipiente que contenga el almidón para que no quede en suspensión en la parte inferior de éste.

A continuación, se cogen 2,0 mL de la disolución del vaso A y se vierten en el vaso B.

Por último, se vierte todo el contenido de los vasos B y C en un erlenmeyer y se acciona el cronómetro. Cuando la disolución cambie totalmente de amarillo a color marrón se para el cronómetro y se anotan los resultados obtenidos.

Así pues, se lleva a cabo la reacción repetidas veces y se altera solamente un reactivo cada vez para ver como varía la reacción respecto a él.

Para que los valores fuesen lo más fidedignos posibles, se hicieron tandas de dos reacciones de la misma concentración de reactivos a la vez para que las variables que deben permanecer constantes como la temperatura, la degradación del ácido ascórbico y el grado de suspensión del almidón son las mismas. Solo se usó una solución de vitamina C para toda la tanda para respetar los factores comentados.



Fotografía de una tanda de dos reacciones en la última fase de éstas. Elaboración propia. Fecha: 25-09-2012.

4. Obtención y procesamiento de datos

4.1. Simulación mediante el programa Kintecus⁹

Antes de llevar a cabo la parte experimental, me pareció interesante simular la reacción con el programa *Kintecus* para conocer de qué manera se desarrollaría la reacción y determinar la influencia de cada reactivo inicial en el tiempo en qué se produce la reacción. De todos modos, los gráficos que se pueden obtener de este programa no corresponderán al cien por cien con los resultados experimentales, ya que entran en juego más factores que no se pueden considerar en el programa informático.

Es necesario calcular la concentración de los reactivos utilizados en esta reacción, ya que el programa *Kintecus* representará la variación de dichas concentraciones en función del tiempo. Sólo será aplicable para las constantes de velocidad de las semi-reacciones que se tienen que determinar en el programa y a las que daremos un valor aleatorio, ya que lo desconocemos.

Los reactivos iniciales son, según el mecanismo de reacción detallado previamente, los componentes A, B, L y T. En principio, el reactivo T no se consideraría, pero la tintura de yodo contiene yodo que influye en el transcurso de la reacción.

La concentración del H_2O_2 o componente A es la siguiente, que se obtiene a partir de un volumen de 10,0 mL de H_2O_2 donde un 3% corresponde a la masa de este compuesto:

$$\frac{3 \text{ g}}{100 \text{ mL}} \cdot 10,0 \text{ mL} = 0,3 \text{ g } H_2O_2$$
$$0,3 \text{ g } H_2O_2 \cdot \frac{1 \text{ mol } H_2O_2}{34 \text{ g } H_2O_2} = 0,009 \text{ mol } H_2O_2$$

El volumen total corresponde a la suma de todos los volúmenes presentes en la reacción, de modo que será:

$$V_T = V_{H_2O} + V_{C_6H_8O_6} + V_{tintura} + V_{H_2O_2} + V_{Almidón} =$$
$$= 40,0 \text{ mL} + 2,0 \text{ mL} + 1,0 \text{ mL} + 10,0 \text{ mL} + 1,0 \text{ mL} = 54,0 \text{ mL} = 0,0540 \text{ L}$$

La incertidumbre del volumen total es la siguiente:

$$\Delta V_T = \Delta V_{H_2O} + \Delta V_{C_6H_8O_6} + \Delta V_{tintura} + \Delta V_{H_2O_2} + \Delta V_{Almidón} =$$
$$= 0,1 \text{ mL} + 0,1 \text{ mL} + 0,1 \text{ mL} + 0,1 \text{ mL} + 0,1 \text{ mL} = 0,5 \text{ mL} = 0,0005 \text{ L}$$

⁹ **Kintecus:** Programa que permite simular procesos químicos de equilibrio y cinética. Es de pago, aunque los estudiantes pueden obtener la clave de acceso gratis. Versión utilizada: 4.50 32 bit (Lanzada el 14 de enero de 2012.)

$$M = \frac{n_{H_2O_2}}{v_T} = \frac{0,009 \text{ mol } H_2O_2}{0,0540 \text{ L}} = 0,2 \text{ mol} \cdot L^{-1} H_2O_2$$

Para conocer la incertidumbre de su masa, se considera solamente la incertidumbre del volumen¹⁰:

$$\frac{\Delta m}{m} = \frac{\Delta v}{v} \rightarrow \Delta m = \left(\frac{0,1 \text{ mL}}{10,0 \text{ mL}} \right) \cdot 0,3 \text{ g} = 0,003 \text{ g } H_2O_2$$

La incertidumbre de la cantidad de moles es:

$$\frac{\Delta n_{H_2O_2}}{n_{H_2O_2}} = \frac{\Delta m_{H_2O_2}}{m_{H_2O_2}} \rightarrow \frac{\Delta n_{H_2O_2}}{0,009} = \frac{0,003}{0,3} \rightarrow \Delta n_{H_2O_2} = 0,00009 \text{ mol } H_2O_2$$

Así pues, la incertidumbre de su concentración en la disolución total es:

$$\frac{\Delta M_{H_2O_2}}{M_{H_2O_2}} = \frac{\Delta n_{H_2O_2}}{n_{H_2O_2}} + \frac{\Delta V_T}{V_T} \rightarrow \frac{\Delta M_{H_2O_2}}{0,2} = \frac{0,00009}{0,009} + \frac{0,0005}{0,0540} \rightarrow \Delta M_{H_2O_2} = 0,004 \text{ mol} \cdot L^{-1} H_2O_2$$

$$M = (0,2 \pm 0,004) \text{ mol} \cdot L^{-1} H_2O_2 = 0,2 \text{ mol} \cdot L^{-1} H_2O_2$$

La incertidumbre del H_2O_2 es muy pequeña en comparación con la concentración, de modo que no se considerará.

Para conocer la molaridad del reactivo B o yoduro se coge 1,0 mL de tintura de yodo, que contiene 0,025 g KI, de modo que:

$$0,025 \text{ g KI} \cdot \frac{1 \text{ mol KI}}{166 \text{ g KI}} \cdot \frac{1 \text{ mol } I^-}{1 \text{ mol KI}} = 0,00015 \text{ mol } I^-$$

$$M = \frac{n_{I^-}}{v_T} = \frac{0,00015 \text{ mol } I^-}{0,0540 \text{ L}} = 0,0028 \text{ mol} \cdot L^{-1} I^-$$

Se procede del mismo modo que con el H_2O_2 , así que su incertidumbre es:

¹⁰ Dado que en la etiqueta del producto no se indica la incertidumbre asociada a la concentración del reactivo, se considerará que ésta es negligible. Este mismo criterio se utiliza para calcular las concentraciones de los otros reactivos que intervienen en la reacción.

$$\frac{\Delta m}{m} = \frac{\Delta v}{v} \rightarrow \Delta m = \left(\frac{0,1 \text{ mL}}{1,0 \text{ mL}} \right) \cdot 0,025 \text{ g} = 0,003 \text{ g } I^-$$

$$\frac{\Delta n_{I^-}}{n_{I^-}} = \frac{\Delta m_{I^-}}{m_{I^-}} \rightarrow \frac{\Delta n_{I^-}}{0,00015} = \frac{0,003}{0,025} \rightarrow \Delta n_{I^-} = 0,00002 \text{ mol } I^-$$

$$\frac{\Delta M_{I^-}}{M_{I^-}} = \frac{\Delta n_{I^-}}{n_{I^-}} + \frac{\Delta V_T}{V_t} \rightarrow \frac{\Delta M_{I^-}}{0,0028} = \frac{0,00002}{0,00015} + \frac{0,0005}{0,0540} \rightarrow \Delta M_{I^-} = 0,0004 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} I^-$$

Por lo tanto:

$$M = (0,0028 \pm 0,0004) \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} I^-$$

La molaridad del reactivo limitante o vitamina C se obtiene a partir de 2,0 mL de disolución de $C_6H_8O_6$, tal y como sigue:

$$\frac{1000 \text{ mg } C_6H_8O_6}{60 \text{ mL}} \cdot 2,0 \text{ mL} = 33 \text{ mg} = 0,033 \text{ g}$$

$$0,033 \text{ g } C_6H_8O_6 \cdot \frac{1 \text{ mol } C_6H_8O_6}{176 \text{ g } C_6H_8O_6} = 0,00019 \text{ mol } C_6H_8O_6$$

$$M = \frac{n_{C_6H_8O_6}}{v_T} = \frac{0,00019 \text{ mol } C_6H_8O_6}{0,0540 \text{ L}} = 0,0035 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} C_6H_8O_6$$

Del mismo modo que anteriormente, la incertidumbre de la molaridad de la vitamina C es:

$$\frac{\Delta m}{m} = \frac{\Delta v}{v} \rightarrow \Delta m = \left(\frac{0,1 \text{ mL}}{2,0 \text{ mL}} \right) \cdot 0,033 \text{ g} = 0,002 \text{ g } C_6H_8O_6$$

$$\frac{\Delta n_{C_6H_8O_6}}{n_{C_6H_8O_6}} = \frac{\Delta m_{C_6H_8O_6}}{m_{C_6H_8O_6}} \rightarrow \frac{\Delta n_{C_6H_8O_6}}{0,00019} = \frac{0,002}{0,033} \rightarrow \Delta n_{C_6H_8O_6} = 0,00001 \text{ mol } C_6H_8O_6$$

$$\frac{\Delta M_{C_6H_8O_6}}{0,0035} = \frac{0,00001}{0,00019} + \frac{0,0005}{0,0540} \rightarrow \Delta M_{C_6H_8O_6} = 0,0002 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} C_6H_8O_6$$

Así pues:

$$M = (0,0035 \pm 0,0002) \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ C}_6\text{H}_8\text{O}_6$$

Por último, el componente T o yodo inicial, obtenido a partir de 1,0 mL de tintura de yodo, con lo que hay 0,020 g de I_2 , tiene una concentración de:

$$0,020 \text{ g } I_2 \cdot \frac{1 \text{ mol } I_2}{127 \text{ g } I_2} = 0,00016 \text{ mol } I_2$$
$$M = \frac{n I_2}{V_T} = \frac{0,00016 \text{ mol } I_2}{0,0540 \text{ L}} = 0,0030 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} I_2$$

Su incertidumbre puede calcularse del mismo modo que previamente:

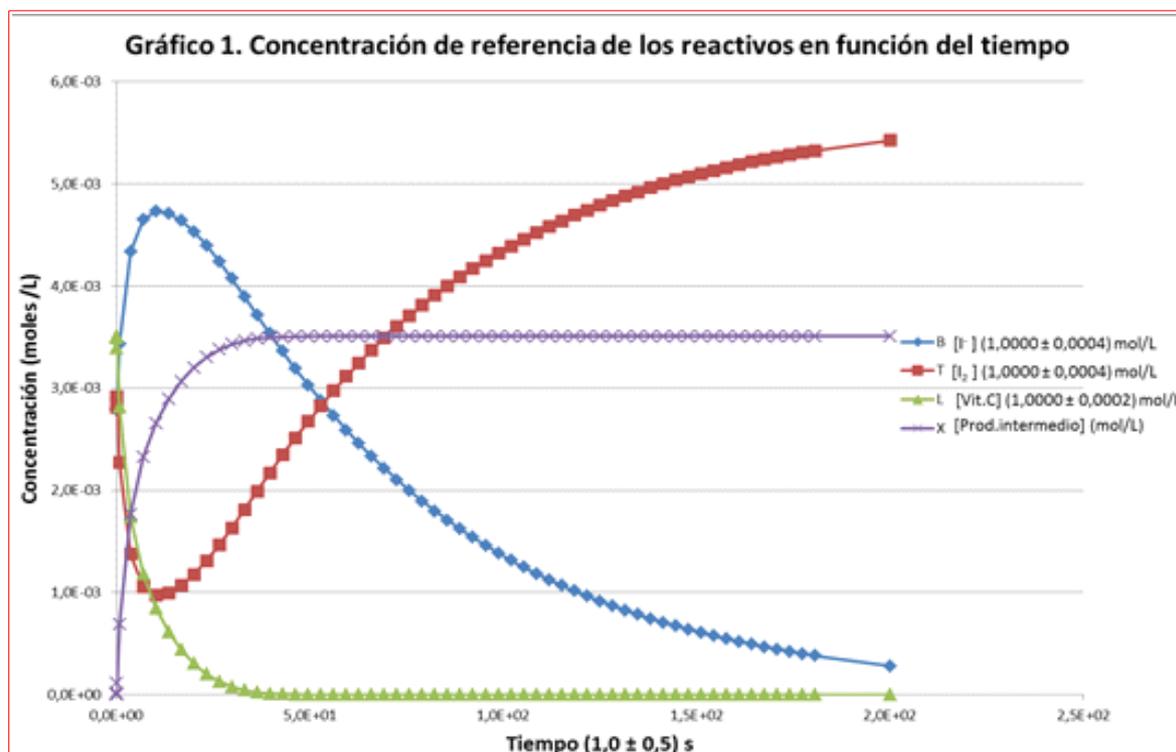
$$\frac{\Delta m}{m} = \frac{\Delta v}{v} \rightarrow \Delta m = \left(\frac{0,1 \text{ mL}}{1,0 \text{ mL}} \right) \cdot 0,020 \text{ g} = 0,002 \text{ g } I_2$$
$$\frac{\Delta n_{I_2}}{n_{I_2}} = \frac{\Delta m_{I_2}}{m_{I_2}} \rightarrow \frac{\Delta n_{I_2}}{0,00016} = \frac{0,002}{0,020} \rightarrow \Delta n_{I_2} = 0,00002 \text{ mol } I_2$$
$$\frac{\Delta M_{I_2}}{M_{I_2}} = \frac{\Delta n_{I_2}}{n_{I_2}} + \frac{\Delta V_T}{V_T} \rightarrow \frac{\Delta M_{I_2}}{0,0030} = \frac{0,00002}{0,00016} + \frac{0,0005}{0,0540} \rightarrow \Delta M_{I_2} = 0,0004 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} I_2$$

De este modo:

$$M = (0,0030 \pm 0,0004) \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} I_2$$

Con estas concentraciones y estableciendo unos valores hipotéticos de la constante de velocidad, considerando que la de la etapa rápida será unas 100 veces mayor que la otra, se puede representar en el *Kintecus* la concentración de estos reactivos respecto al tiempo. Esto es posible determinando el mecanismo de la reacción en el programa, aunque la última semi-reacción no se considerará porque sino se tendría que tener en cuenta la concentración del almidón, que sólo actúa como indicador. Por lo tanto, me centraré en el instante en que la vitamina C o reactivo limitante se agota, ya que es en ese instante cuando el yodo puede reaccionar con el almidón en la última semi-reacción. Además, el peróxido de hidrógeno se tiene en cuenta aunque no aparece representado en los gráficos porque su

concentración difiere demasiado en comparación con las otras, así que no se podría observar bien la evolución del reactivo limitante¹¹.



En este gráfico, tomaremos como referencia la abscisa de uno de los primeros puntos representados en qué el reactivo limitante L se ha consumido por completo, como por ejemplo (36,0 ± 0,5) s, para comparar con el comportamiento del reactivo limitante cuando se aumenta uno de los reactivos iniciales.

Primeramente, duplicamos la concentración de la vitamina C para representar su gráfico correspondiente con el programa *Kintecus*:

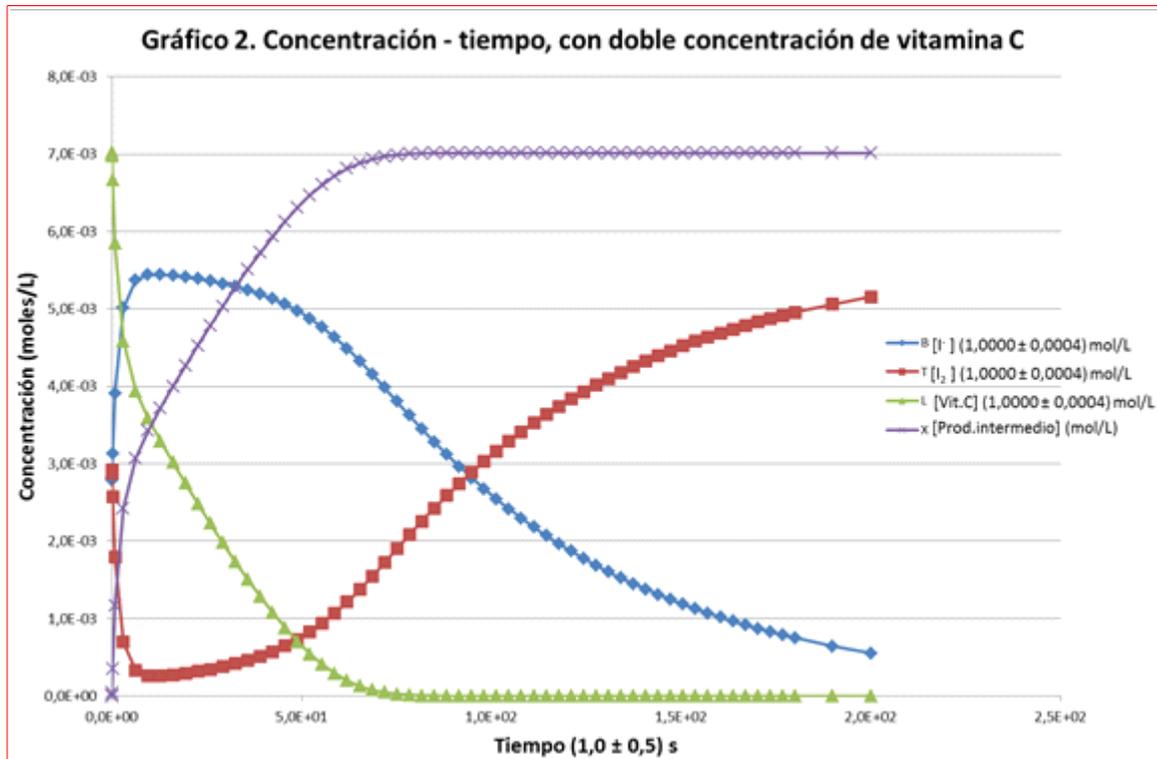
$$M = 0,0035 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ C}_6\text{H}_8\text{O}_6 \cdot 2 = 0,0070 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ C}_6\text{H}_8\text{O}_6$$

Para conocer la incertidumbre de la molaridad duplicada de un reactivo se opera del siguiente modo:

$$\frac{\Delta M_2}{M_2} = \frac{\Delta M_1}{M_1} \rightarrow \Delta M_2 = \left(\frac{\Delta M_1}{M_1} \right) \cdot M_2 = \frac{M_2}{M_1} \cdot \Delta M_1 = \frac{2M_1}{M_1} \cdot \Delta M_1 = 2 \cdot \Delta M_1$$

$$\Delta M = 0,0002 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ C}_6\text{H}_8\text{O}_6 \cdot 2 = 0,0004 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ C}_6\text{H}_8\text{O}_6$$

¹¹ Todos los gráficos se efectuaron con el programa *Kintecus*.



En este caso, se vuelve a tomar la abscisa de uno de los primeros puntos en que L ha desaparecido, como el valor $(72,0 \pm 0,5)$ segundos, y se contrasta con el valor de referencia. Puede apreciarse que el tiempo de reacción aumenta considerablemente, ya que es prácticamente el doble que el de partida.

Seguidamente, efectuamos lo mismo pero con el doble de tintura de yodo, donde se tienen que considerar tanto el yoduro B como el yodo inicial T:

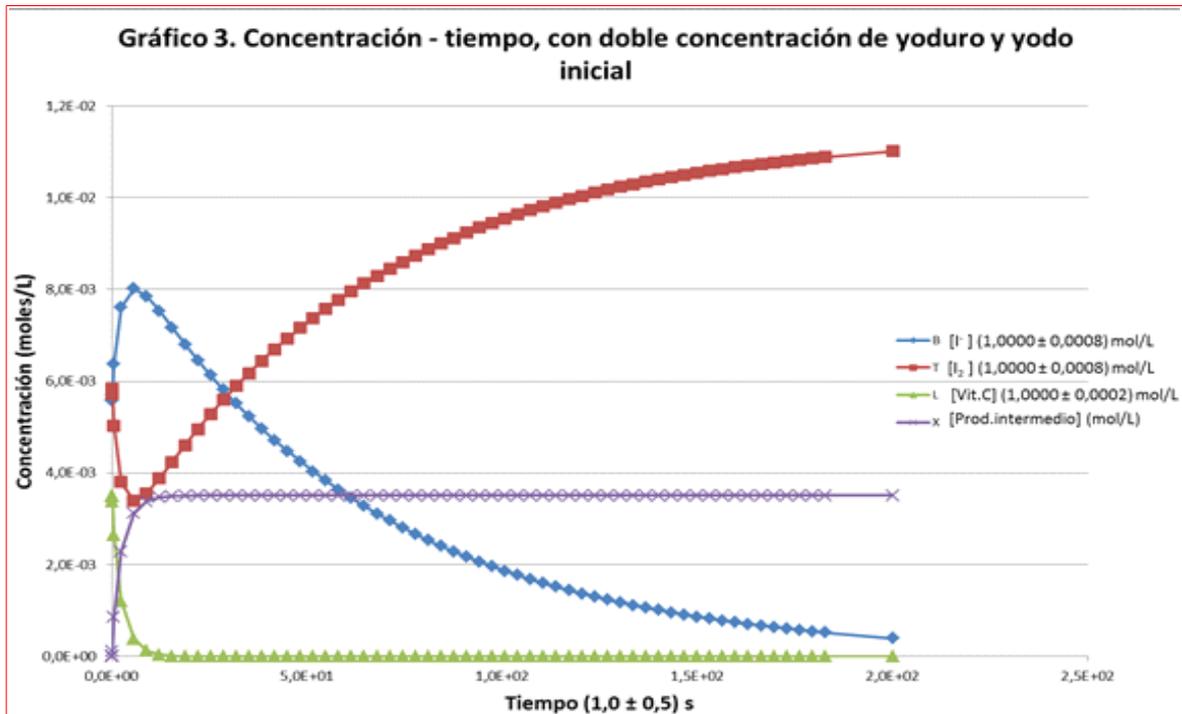
$$M = 0,0028 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ I}^{-} \cdot 2 = 0,0056 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ I}^{-}$$

$$\Delta M = 0,0004 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ I}^{-} \cdot 2 = 0,0008 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ I}^{-}$$

$$M = 0,0030 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ I}_2 \cdot 2 = 0,0060 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ I}_2$$

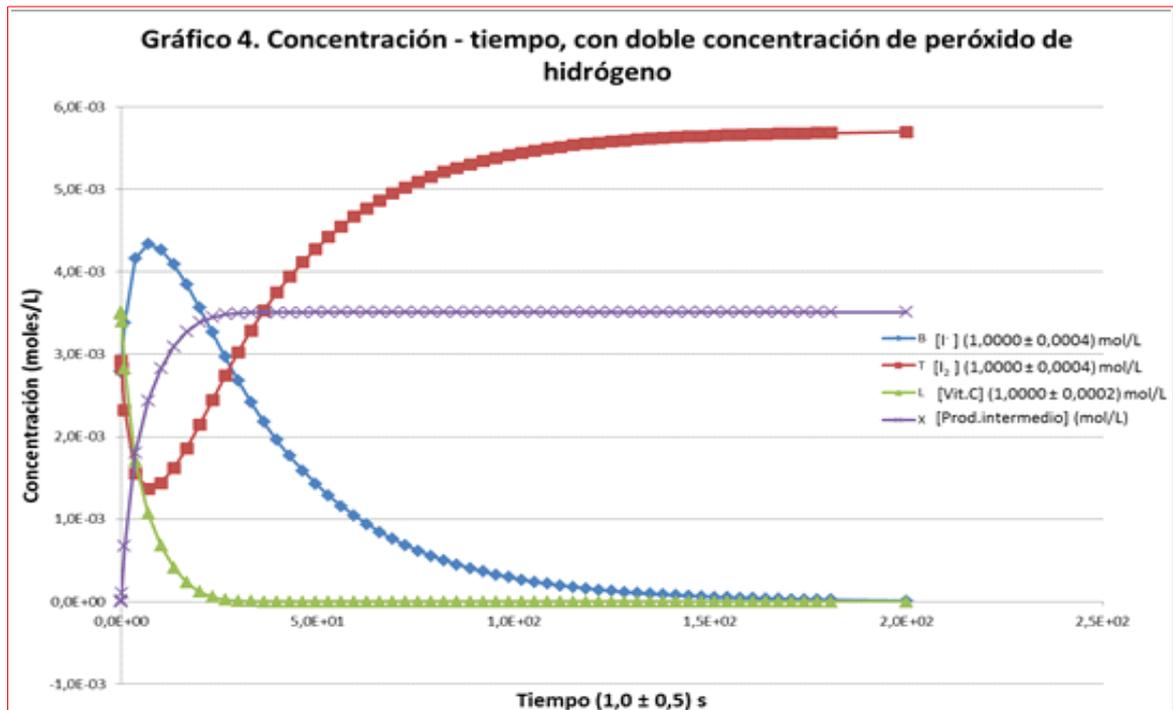
$$\Delta M = 0,0004 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ I}_2 \cdot 2 = 0,0008 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ I}_2$$

El valor de la abscisa del punto de la representación de L a considerar es $(12,0 \pm 0,5)$ segundos, que al equiparar con la del punto de referencia se ve que el tiempo de reacción es una tercera parte del primer tiempo.



Por último, realizamos este mismo procedimiento con el doble de H_2O_2 :

$$M = 0,2 \text{ mol} \cdot L^{-1} H_2O_2 \cdot 2 = 0,4 \text{ mol} \cdot L^{-1} H_2O_2$$



En este caso, se vuelve a tomar la abscisa de uno de los primeros puntos en que L ha desaparecido, por ejemplo el valor $(23,0 \pm 0,5)$ s, y se contrasta con el valor de referencia. Se puede ver que el tiempo de reacción disminuye bastante.

4.2. Obtención de datos experimentales

Se observa que al mezclar la disolución del vaso A con el vaso B, la solución pasa del color rojizo de la tintura de yodo a anaranjado. Esto se debe a que tiene lugar la segunda reacción, es decir, el yodo reacciona con la vitamina C para formar yoduro, que es incoloro, pero como que los comprimidos de $C_6H_8O_6$ utilizados llevan colorante naranja, entonces solamente se aprecia un cambio a un color más claro. En realidad, el producto final de la reacción debería ser de color azul oscuro, ya que el ácido ascórbico es incoloro, pero el colorante que lleva la vitamina C hace que su color final sea marrón.

Tabla 1. Volúmenes iniciales y tiempo obtenido en las cinco variantes realizadas de experimentos.¹²

Vol. H_2O /mL ($\pm 0,1$ mL)	Vol. Vitamina C/mL ($\pm 0,1$ mL)	Vol. Tintura/mL ($\pm 0,1$ mL)	Vol. H_2O_2 /mL ($\pm 0,1$ mL)	Vol. Almidón/mL ($\pm 0,1$ mL)	Tiempo/s ($\pm 0,5$ s)	Tiempo medio/s ($\pm 0,5$ s)
40,0	2,0	1,0	10,0	1,0	90,0	84,0
40,0	2,0	1,0	10,0	1,0	85,0	
40,0	2,0	1,0	10,0	1,0	77,0	
38,0	4,0	1,0	10,0	1,0	230,0	220,0
38,0	4,0	1,0	10,0	1,0	230,0	
38,0	4,0	1,0	10,0	1,0	220,0	
38,0	4,0	1,0	10,0	1,0	220,0	
39,0	2,0	2,0	10,0	1,0	36,0	33,0
39,0	2,0	2,0	10,0	1,0	32,0	
39,0	2,0	2,0	10,0	1,0	34,0	
39,0	2,0	2,0	10,0	1,0	32,0	
30,0	2,0	1,0	20,0	1,0	45,0	48,0
30,0	2,0	1,0	20,0	1,0	43,0	
30,0	2,0	1,0	20,0	1,0	43,0	
30,0	2,0	1,0	20,0	1,0	62,0	
40,0	2,0	1,0	10,0	1,0	82,0	79,0
40,0	2,0	1,0	10,0	1,0	85,0	
40,0	2,0	1,0	10,0	1,0	73,0	
40,0	2,0	1,0	10,0	1,0	77,0	

Las concentraciones que se duplicaron se encuentran en las celdas de color turquesa. La presión atmosférica y la temperatura se mantuvieron constantes.

¹² Investigación llevada a cabo en los laboratorios de Química Inorgánica de la Universidad de Gerona.

En las primeras tandas del primer experimento se obtuvieron valores que variaban demasiado entre sí, de modo que se volvió a repetir hasta dar con resultados más coherentes y parecidos entre ellos. El tiempo medio obtenido se usará en cierto modo como referencia para comparar con cuando se cambia algún reactivo.

El segundo experimento consistió en duplicar el volumen de la disolución de $C_6H_8O_6$ y medir el tiempo en qué sucede la reacción. Se puede ver que el tiempo en producirse el complejo $I_{2(aq)}$ - almidón incrementa considerablemente. Esto se debe a que, para que el complejo final pueda aparecer, el reactivo limitante debe desaparecer primero. Si se duplica el reactivo limitante, la reacción tardará más en efectuarse porque se necesitará más tiempo para que desaparezca la vitamina C. Además, se puede observar que la relación entre el tiempo de este experimento y el de referencia corresponden con la encontrada con el programa *Kintecus*.

En la tercera parte, el volumen de la tintura de yodo se duplica. Esto supone que se multiplica por dos la concentración de yodo así como la concentración de yoduro, ya que este antiséptico contiene ambos. El tiempo obtenido se reduce a más de la mitad si lo comparamos con el de la reacción de referencia, ya que la cantidad de yoduro que da lugar al yodo en la primera semi-reacción es superior. Este yodo, en la segunda etapa, puede reaccionar con la vitamina C, de modo que se consume más rápidamente el reactivo limitante y, por lo tanto, se finaliza antes la reacción. Además, al añadir más yodo inicial lo comentado anteriormente puede producirse aún más deprisa. También en este caso se puede apreciar que lo que se predijo mediante el uso del *Kintecus* corresponde con la tendencia obtenida de la experimentación.

Seguidamente, dupliqué el volumen de la disolución comercial de agua oxigenada, que resultó en la reducción del tiempo de finalización a casi la mitad del tiempo de referencia. Tal resultado es justificable si se considera que en la primera etapa de la reacción el agua oxigenada reacciona con el yoduro para producir yodo que, como he destacado previamente, provoca que la vitamina C reaccione hasta terminarse para dar el complejo final al juntarse con el almidón. Como en los casos anteriores, esta diferencia entre el tiempo medio de referencia y el tiempo obtenido en la cuarta experiencia concuerda con la relación establecida previamente al simular informáticamente la reacción.

Por último, quise ver el efecto de un agitador magnético en el curso de la reacción¹³. Es posible apreciar que el tiempo medio de la reacción con agitador se reduce un poco, aunque no en gran medida.



Ilustración 1: Fotografía de una tándem de dos reacciones con agitación magnética. Elaboración propia. Fecha: 25-09-2012.

4.3. Análisis de los datos obtenidos

Al tratarse de una reacción con un mecanismo complejo, se puede llegar a encontrar su ecuación de velocidad global gracias a la parte experimental realizada anteriormente, así como su constante de velocidad y el orden de reacción de los principales reactivos; aunque no es posible hallar la constante de velocidad de las reacciones intermedias con los datos que se poseen. Aún y así, se puede considerar que la velocidad y la constante de velocidad de la reacción global equivalen a las de la primera etapa de la reacción, ya que al tratarse de la más lenta determina la velocidad global.

Los reactivos a tener en cuenta son el H_2O_2 , el yoduro y la vitamina C, es decir, los reactivos A, B y L. De este modo, la ecuación de la velocidad global es la siguiente:

$$v = k \cdot [A]^a \cdot [B]^b \cdot [L]^l$$

A la vez, esta velocidad se puede expresar como el cociente de la variación de la concentración de un reactivo, que en este caso consideraremos la variación de la vitamina C debido a que al ser el reactivo limitante sabemos que se agota cuando la reacción cambia de color:

¹³ En química, la agitación provoca que se mezclen los reactivos del interior de un fluido, que a su vez aumentan la superficie de contacto entre sus partículas.

[Fuente: http://www.fisicanet.com.ar/quimica/cinetica_quimica/ap01_cinetica_quimica.php#.UHjBecVmL] (Consultada el 7/10/2012.)

$$v = -\frac{\Delta[L]}{\Delta t} = -\frac{([L]_f - [L]_o)}{\Delta t} = -\frac{(0 - [L]_o)}{\Delta t} = \frac{[L]_o}{\Delta t}$$

De modo que se pueden igualar estas expresiones:

$$v = \frac{[L]_o}{\Delta t} = k \cdot [A]^a \cdot [B]^b \cdot [L]^l$$

Por otra parte, se pueden considerar cuatro ecuaciones distintas de la misma reacción, ya que hemos realizado el experimento cuatro veces. Por lo tanto, se tienen las siguientes variables en cada experimento:

Tabla 2. Conjunto de variables a considerar en cada experimentación.

Experimento 1	v_1	k	$[A]_1$	$[B]_1$	$[L]_1$
Experimento 2	v_2	k	$[A]_2 = [A]_1$	$[B]_2 = [B]_1$	$[L]_2 = 2[L]_1$
Experimento 3	v_3	k	$[A]_3 = [A]_1$	$[B]_3 = 2[B]_1$	$[L]_3 = [L]_1$
Experimento 4	v_4	k	$[A]_4 = 2[A]_1$	$[B]_4 = [B]_1$	$[L]_4 = [L]_1$

La constante de velocidad k es la misma porque es característica de la reacción. Como las concentraciones de los reactivos se variaron duplicando la concentración de los reactivos del primero experimento, se pueden simplificar las variables como se indica en la tabla anterior. Con este mismo principio puede calcularse la velocidad de cada experiencia, ya que:

$$v_1 = \frac{[L]_1}{\Delta t_1} = \frac{0,0035 \text{ mol} \cdot L^{-1} C_6H_8O_6}{84,0 \text{ s}} = 0,000042 \text{ mol} \cdot L^{-1} \cdot s^{-1}$$

$$\frac{\Delta v_1}{v_1} = \frac{\Delta[L]_1}{[L]_1} + \frac{\Delta(\Delta t_1)}{\Delta t_1} \rightarrow \frac{\Delta v_1}{0,000042} = \frac{0,0002}{0,0035} + \frac{0,5}{84,0} \rightarrow \Delta v_1 = 0,000003 \text{ mol} \cdot L^{-1} \cdot s^{-1}$$

$$v_1 = (0,000042 \pm 0,000003) \text{ mol} \cdot L^{-1} \cdot s^{-1}$$

$$v_2 = \frac{2[L]_1}{\Delta t_2} = \frac{0,0070 \text{ mol} \cdot L^{-1} C_6H_8O_6}{220,0 \text{ s}} = 0,000032 \text{ mol} \cdot L^{-1} \cdot s^{-1}$$

$$\frac{\Delta v_2}{v_2} = \frac{\Delta 2[L]_1}{2[L]_1} + \frac{\Delta(\Delta t_2)}{\Delta t_2} \rightarrow \frac{\Delta v_2}{0,000032} = \frac{0,0004}{0,0070} + \frac{0,5}{220,0} \rightarrow \Delta v_2 = 0,000002 \text{ mol} \cdot L^{-1} \cdot s^{-1}$$

$$v_2 = (0,000032 \pm 0,000002) \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$v_3 = \frac{[L]_1}{\Delta t_3} = \frac{0,0035 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ C}_6\text{H}_8\text{O}_6}{33,0 \text{ s}} = 0,00011 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$\frac{\Delta v_3}{v_3} = \frac{\Delta[L]_1}{[L]_1} + \frac{\Delta(\Delta t_3)}{\Delta t_3} \rightarrow \frac{\Delta v_3}{0,00011} = \frac{0,0002}{0,0035} + \frac{0,5}{33,0} \rightarrow \Delta v_3 = 0,000008 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$v_3 = (0,00011 \pm 0,000008) \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} = (0,00011 \pm 0,00001) \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$v_4 = \frac{[L]_1}{\Delta t_4} = \frac{0,0035 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ C}_6\text{H}_8\text{O}_6}{48,0 \text{ s}} = 0,000073 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$\frac{\Delta v_4}{v_4} = \frac{\Delta[L]_1}{[L]_1} + \frac{\Delta(\Delta t_4)}{\Delta t_4} \rightarrow \frac{\Delta v_4}{0,000073} = \frac{0,0002}{0,0035} + \frac{0,5}{48,0} \rightarrow \Delta v_4 = 0,000005 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$v_4 = (0,000073 \pm 0,000005) \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

Seguidamente, se empezará por calcular el orden de reacción de la vitamina C, que se puede encontrar si se divide la expresión de la velocidad de la primera experiencia entre la de la segunda:

$$\frac{v_1}{v_2} = \frac{k \cdot [A]_1^a \cdot [B]_1^b \cdot [L]_1^l}{k \cdot [A]_2^a \cdot [B]_2^b \cdot [L]_2^l} = \frac{k \cdot [A]_1^a \cdot [B]_1^b \cdot [L]_1^l}{k \cdot [A]_1^a \cdot [B]_1^b \cdot (2[L]_1)^l} = \frac{[L]_1^l}{(2[L]_1)^l} = \left(\frac{[L]_1}{2[L]_1}\right)^l = \left(\frac{1}{2}\right)^l$$

Se opera el primer cociente y se iguala la expresión mencionada:

$$\frac{v_1}{v_2} = \frac{0,000042 \text{ moles/L} \cdot \text{s}}{0,000032 \text{ moles/L} \cdot \text{s}} = 1,3$$

$$1,3 = \left(\frac{1}{2}\right)^l$$

Finalmente, se puede encontrar el valor del orden de reacción l de la vitamina C mediante el uso de logaritmos neperianos, ya que permiten bajar exponentes:

$$\ln 1,3 = l \cdot \ln 0,5 \rightarrow l = -0,38$$

Este orden de reacción es negativo debido a que actúa de forma contraria, es decir, cuanto más concentración de $C_6H_8O_6$, más lentamente transcurre la reacción.

A continuación, se efectúa el mismo procedimiento dividiendo la primera experiencia entre la tercera, ya que de este modo se obtiene el orden de reacción b del yoduro:

$$\frac{v_1}{v_3} = \frac{k \cdot [A]_1^a \cdot [B]_1^b \cdot [L]_1^l}{k \cdot [A]_3^a \cdot [B]_3^b \cdot [L]_3^l} = \frac{k \cdot [A]_1^a \cdot [B]_1^b \cdot [L]_1^l}{k \cdot [A]_1^a \cdot (2[B]_1)^b \cdot [L]_1^l} = \frac{[B]_1^b}{(2[B]_1)^b} = \left(\frac{[B]_1}{2[B]_1}\right)^b = \left(\frac{1}{2}\right)^b$$

Se resuelve la división entre velocidades para poder igualar la ecuación:

$$\frac{v_1}{v_3} = \frac{0,000042 \text{ moles/L} \cdot \text{s}}{0,00011 \text{ moles/L} \cdot \text{s}} = 0,38$$
$$0,38 = \left(\frac{1}{2}\right)^b$$

Por lo tanto, si se usan logaritmos neperianos se puede obtener el valor experimental de b :

$$\ln 0,38 = b \cdot \ln 0,5 \rightarrow b = 1,4$$

Para hallar a , que es el orden de reacción del H_2O_2 , se realiza el cociente de la experimentación de referencia entre la cuarta experimentación:

$$\frac{v_1}{v_4} = \frac{k \cdot [A]_1^a \cdot [B]_1^b \cdot [L]_1^l}{k \cdot [A]_4^a \cdot [B]_4^b \cdot [L]_4^l} = \frac{k \cdot [A]_1^a \cdot [B]_1^b \cdot [L]_1^l}{k \cdot (2[A]_1)^a \cdot [B]_1^b \cdot [L]_1^l} = \frac{[A]_1^a}{(2[A]_1)^a} = \left(\frac{[A]_1}{2[A]_1}\right)^a = \left(\frac{1}{2}\right)^a$$

Todo seguido, se vuelven a llevar a cabo los mismos pasos que en los casos anteriores:

$$\frac{v_1}{v_4} = \frac{0,000042 \text{ moles/L} \cdot \text{s}}{0,000073 \text{ moles/L} \cdot \text{s}} = 0,58$$
$$0,58 = \left(\frac{1}{2}\right)^a$$

Se baja el exponente con logaritmos neperianos y se obtiene el valor de la incógnita a :

$$\ln 0,58 = a \cdot \ln 0,5 \rightarrow a = 0,79$$

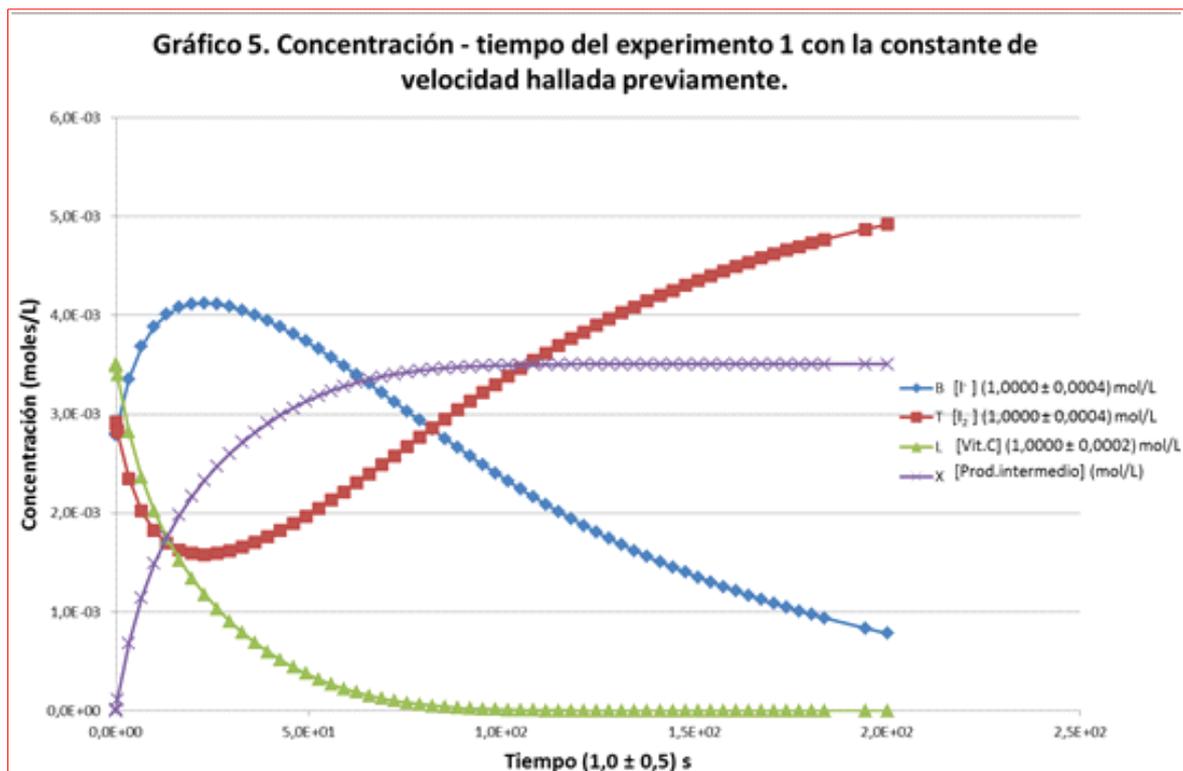
Entonces ya se puede obtener la constante de velocidad k , ya que es la única variable desconocida que queda por encontrar:

$$v_1 = k \cdot [A]_1^a \cdot [B]_1^b \cdot [L]_1^l$$

$$k = \frac{v_1}{[A]_1^a \cdot [B]_1^b \cdot [L]_1^l} = \frac{0,000042}{(0,2)^{0,79} \cdot (0,0028)^{1,4} \cdot (0,0035)^{-0,38}} = 0,07$$

4.4. Simulación de la reacción a partir de los datos obtenidos

Ahora que ya se conoce la k experimental de esta reacción, se puede volver a representar un gráfico de concentración en función del tiempo con el programa *Kintecus* a partir del valor obtenido de la constante de velocidad en la etapa más lenta de la reacción. Esto permitirá observar la evolución de los distintos reactivos a medida que transcurre el experimento de referencia, ya que se ha asignado un valor hipotético a la constante de velocidad de la etapa rápida que hace que concuerde de forma aproximada el momento en qué el reactivo limitante L se agota con el tiempo medio obtenido experimentalmente.



5. Conclusión

En primer lugar, al simular la reacción pude observar algunas tendencias y relaciones entre las concentraciones de los reactivos determinantes y el tiempo en qué acontece la reacción, que me permitieron plantear el modo en qué se podría llevar a cabo la parte experimental, así como las variables que se podrían modificar en ésta. Ciertamente, resultó de gran uso debido a que al comparar ambos procedimientos observé que la relación entre los valores de un método concuerdan con las del otro.

Principalmente, pude observar que si se aumenta la concentración de un reactivo en esta reacción, su velocidad también incrementa, exceptuando el reactivo limitante $C_6H_8O_6$ que imposibilita que termine la reacción si no se ha consumido íntegramente. Asimismo, se comprobó que en esta reacción el uso de la agitación magnética no es un factor influyente, ya que el tiempo en que finalizó la reacción no varió excesivamente del tiempo obtenido sin utilizar agitador magnético.

Además, se establecieron experimentalmente los valores de los órdenes y la constante de velocidad de la reacción global considerada, que fueron unos de los objetivos planteados inicialmente. Primeramente, encontré que el orden de reacción de la vitamina C es -0,38, que es negativo porque ralentiza la reacción, el del yoduro es 1,4 y el del H_2O_2 es 0,79. A continuación y mediante los valores obtenidos en el paso anterior, pude hallar la constante de velocidad de la etapa determinante o etapa lenta, que es 0,07.

Por otra parte, considero que la parte práctica fue muy satisfactoria debido a que los datos del tiempo de reacción en cada experimento no variaban considerablemente entre ellos, de modo que, a mi parecer, resultaron más fiables y no acumularon demasiado error. Personalmente, considero que si hubiese efectuado esta experimentación con reactivos de laboratorio aún serían más precisos los resultados, aunque pienso que era más importante considerar las implicaciones medioambientales y la alternativa de una química verde y que se pudiese llevar a cabo con facilidad en cualquier entorno doméstico.

Por lo tanto, me gustaría continuar estudiando esta reacción en un futuro y profundizar aún más en esta temática variando otros factores que influyen en la reacción, como por ejemplo la temperatura, para observar su efecto en la reacción global. Otra alternativa sería repetir este experimento con productos de laboratorio y comparar los datos obtenidos con los resultados de esta monografía.

6. Bibliografía

GARCÍA POZO, TOMÁS. *Química I, Batxillerat*. Barcelona: Edebé, 2002.

GARCÍA POZO, TOMÁS. *Química II, Batxillerat*. Barcelona: Edebé, 2009.

IANNI, JAMES C. "A Comparison of the Bader-Deuffhard and the Cash-Karp Runge-Kutta Integrators for the GRI-MECH 3.0 Model Based on the Chemical Kinetics Code Kintecus." *Computational Fluid and Solid Mechanics*. Bathe, K. J. Ed.; Oxford, UK: Elsevier Science Ltd, 2003. págs. 1368-1372.

IANNI, JAMES C. *Kintecus*, computer software. *Kintecus - Enzyme & Combustion Chemical Kinetics and Equilibrium Software*. Vers. 4.50 32 Bit. <http://www.kintecus.com/> (Consultada el 31/07/2012.)

MURILLO PULGARÍN, JOSÉ A. *La Reacción De Landolt Y Algunas Modificaciones Como Recurso Didáctico*. Colegio De Químicos Y Asociación De Químicos De La Comunidad Valenciana, publicado el 11/09/2009. <http://www.colegioquimicos.com/system/files/sites-available/colegiodequimicos/files/15+LA+REACCI%C3%93N+DE+LANDOLT+Y+ALGUNAS+MODIFICACIONES.pdf> (Consultada el 19/06/2012.)

SHAKHASHIRI, BASSAM Z. "Chapter 10: Clock Reactions." *Chemical Demonstrations: A Handbook for Teachers of Chemistry*. Vol. 4. Madison: University of Wisconsin, 1989. Págs. 3-86. Edición virtual.

UNIVERSIDAD DE OVIEDO. *Reacción Reloj*. Oficina De Transferencia De Resultados De Investigación De La Universidad De Oviedo, publicado el 12/11/2007. http://www.otri.uniovi.es/Experimentos/documentos/Reaccion_reloj.pdf (Consultada el 19/06/2012.)

WRIGHT, STEPHEN. W. "The Vitamin C Clock Reaction." *Journal of Chemical Education*, Vol. 79, No. 1. Enero 2002. págs. 40A-40B.

WRIGHT, STEPHEN. W. "The Vitamin C Clock Reaction." *Journal of Chemical Education*, Vol. 79, No. 1. Enero 2002. págs. 41-43.