

ENERGÍA DE ACTIVACIÓN Y VELOCIDAD DE DEGRADACIÓN DE BOLSAS DE POLIETILENO.

RESUMEN

El tema que se abordara en este trabajo de investigación, es de suma importancia, para la protección del medio ambiente y sobre todo de minimizar la contaminación que existe en nuestro país. Hablaremos de lo que son las bolsas de polietileno (plástico) degradables y los componentes que presentan para poder desintegrarse en menos tiempo que las bolsas no degradables, que no contienen los aditamentos necesarios para su asimilación en la tierra.

Con ayuda del “Instituto de Investigaciones en Materiales” perteneciente a la UNAM, logramos obtener los datos, de cómo una muestra de bolsa degradable y una no degradable se desintegran con respecto a la temperatura. Una vez asociada toda esta información y analizada, no solo desde la perspectiva de la química, si no para obtener un enfoque más profundo, con la asesoría del profesor de Cálculo Diferencial e Integral perteneciente al CCH, nos propusimos aplicar los conocimientos adquiridos en la clase de Matemáticas relacionados con temas como: funciones exponenciales, logarítmicas y sus derivadas para calcular la velocidad de degradación de las bolsas, así como, la ecuación de Arrhenius para determinar la energía de activación de cada una de las bolsas. Con esta investigación se espera, generar conciencia del daño que le estamos haciendo a nuestro planeta y promover el uso de bolsas degradables a favor del medio ambiente y por supuesto para beneficio de la sociedad y del país.

MARCO TEÓRICO

En los últimos años el aumento incontrolado de la contaminación al ambiente ha preocupado a muchas personas con lo que se ha comenzado a investigar más sobre cómo crear plásticos más “amigables con el ambiente”. Sin embargo es importante conocer más afondo este tipo de plásticos que son utilizados por ejemplo en la fabricación de bolsas.

Algunas aplicaciones que se le da a los polímeros es la creación de plásticos, los cuales surgieron a finales del siglo XIX con el fin de sustituir a materiales naturales. Durante el siglo XX se trabajó en el desarrollo de plásticos más durables y resistentes, con propiedades superiores a las de materiales tradicionales. Al iniciar el siglo XXI la escasez de recursos y la problemática ambiental han abierto la puerta al desarrollo de materiales que se puedan degradar en un periodo de tiempo menor.

La degradación es el deterioro, desintegración y pérdida de propiedades de un material o sustancia. Prácticamente todos los materiales se degradan, lo que varía es el tiempo en que ocurre el proceso; cuando tardan periodos largos en hacerlo se consideran normalmente como “no degradables”.

Tanto las bolsas degradables como las no degradables están hechas de polímeros, podemos definir a los polímeros (también llamados homopolímeros), como una macromolécula grande compuesta de muchas unidades más pequeñas (monómeros) unidas entre sí. Son sustancias químicas de la naturaleza compuestas por largas cadenas, cuya base son los enlaces de carbono, hidrogeno, oxígeno y nitrógeno. Estos, tienen un peso molecular elevado y los podemos dividir, según su origen, en dos clases: naturales y sintéticos.

Entre los polímeros naturales esta el hule, la lana, las proteínas, los ácidos nucleicos, el almidón y la celulosa. Los polímeros sintéticos se fabrican a través de productos derivados de combustibles fósiles, como gas y petróleo, por ejemplo, poliestireno, bakelita, nylon, cloruro de polivinilo, polietileno, entre muchos más.

El polietileno en general es de alta y baja densidad. El polietileno de baja densidad se usa principalmente para fabricar bolsas y envolturas. El de alta densidad, que es un polímero más rígido, se utiliza para fabricar artículos como jarras y platos.

Las bolsas de plástico que dan en las tiendas de algunos supermercados, de color gris, son degradables. Son bolsas fabricadas con plásticos oxobiodegradables, es decir, son plásticos comunes como el polietileno de baja densidad, a los cuales se les agrega entre un 1% y un 4% de un aditivo (puede ser almidón) que permite que en presencia de oxígeno, temperatura y radiación UV del sol se oxiden y fragmenten una vez que ha concluido su vida útil. El almidón es el aditivo más utilizado en la industria para lograr que las grandes cadenas de polietileno se rompan con facilidad después de cierto tiempo. La presencia de agentes foto-oxidantes contribuye a la degradación de las macromoléculas por oxidación. A los polímeros sintéticos que poseen agentes oxidantes como aditivos se los denomina plásticos oxobiodegradables.

Sobre las bolsas de plástico negras, empleadas comúnmente para la basura, la mayoría son "convencionales", es decir, están fabricadas de polietileno de baja densidad y no contienen ningún aditivo que acelere su degradación. Con la característica de que muchas están fabricadas a partir de material reciclado.

Energía de activación

Todas las reacciones químicas tienen una barrera energética que separa a los reactivos de los productos. Esta barrera se denomina energía de activación, que es la mínima cantidad de energía que se requiere para iniciar una reacción, es decir, las moléculas que reaccionarán en un evento químico, deben contener suficiente energía para sobrepasar la energía de activación del estado de transición en su camino para transformarse en los productos.

En general, al disminuir la energía de activación, la mayoría de las moléculas tienen energía suficiente para pasar sobre el estado de transición y por tanto aumenta la velocidad de la reacción.

La ecuación de Arrhenius

En 1889 Svante Arrhenius observó que en la mayoría de las reacciones químicas mostraba una misma dependencia con la temperatura, esta observación se podía describir mediante la siguiente ecuación (Ecuación de Arrhenius):

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

Donde **k** es la constante de velocidad, **A** es el denominado factor de frecuencia, **E_a** es la energía de activación (kJ mol^{-1}), **R** es la constante de los gases ($8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$) y **T** es la temperatura absoluta (K).

Ahora analizaremos cada uno de los componentes de la ecuación:

El factor (**A**) representa la frecuencia de las colisiones entre las moléculas reactivas, este factor depende directamente de la temperatura. A medida que haya más moléculas de los reactivos que van a reaccionar en un volumen dado, ocurrirá mayor número de colisiones entre ellas. Siendo así que las moléculas necesitan cierta energía mínima para que se pueda llevar a cabo una reacción recordando que no todas las moléculas van a producir una reacción. A medida que la energía de activación, es más alta, la fracción de moléculas con suficiente energía para reaccionar es más baja. Como resultado, a medida que la energía de activación es más alta, la reacción se hace más lenta. El factor $e^{\frac{-E_a}{RT}}$ representa precisamente la fracción de las colisiones moleculares con energía igual o mayor que la energía de activación.

El término **E_a** es la mínima cantidad de energía que se requiere para iniciar una reacción química. Esta barrera se denomina energía de activación que es la diferencia en energía que existe entre los reactivos y los productos. El lugar donde la energía libre de activación es máxima, se denomina estado de transición. Este estado de transición es cuando la nube electrónica que rodea a los núcleos de los átomos se reordenan y forman nuevos enlaces. El instante cuando las moléculas chocan se le llama complejo activado.

Ahora al aplicar el logaritmo natural a la ecuación de Arrhenius obtenemos:

$$\ln(k) = \ln(A) - \frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} \right)$$

De esta manera, la gráfica de $\ln(k)$ contra $(1/T)$, da lugar a una línea recta cuya pendiente, que es negativa, es igual a $m = \frac{-E_a}{R}$.

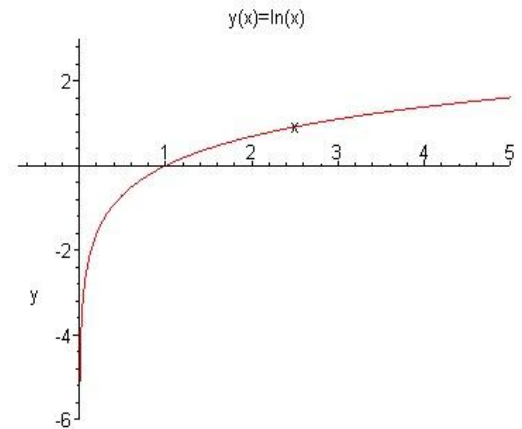
Si se conoce las constantes de rapidez k_1, k_2, k_3 y k_4 a la temperatura T_1, T_2, T_3 y T_4 , al graficar $\ln(k)$ contra $(\frac{1}{T})$ se puede obtener el modelo de regresión lineal a través del método de mínimos cuadrados obteniendo la pendiente m y la constante b , donde $m = \frac{-E_a}{R} \therefore E_a = -mR$, y el factor de frecuencia (A), donde $b = \ln(A) \therefore A = e^b$.

El análisis térmico se utiliza para describir los cambios físicos y químicos de los materiales en función del tiempo y la temperatura. Los cambios que se pueden estudiar son cambio en el peso, en la energía asociada a una transición y en las dimensiones. Entre las técnicas con que cuenta, está el análisis termogravimétrico, esta técnica consiste en determinar la cantidad y la tasa de cambio en la masa que sufre una muestra, como una función de la temperatura o el tiempo, en una atmosfera controlada.

Funciones Exponencial y Logarítmica.

Las funciones exponenciales son aquellas, que tienen una base constante y un exponente variable y son de la forma: $f(x) = a^x$, donde a es una constante positiva, La más común de las funciones exponenciales es la de base "e" ($e=2.718281\dots$), esto es $f(x) = e^x$, y se utilizan para representar muchos fenómenos en ciencias naturales y sociales, pero cualquier base es válida, siempre y cuando sea positiva y diferente de 1. Esto significa, que también son permisibles las bases fraccionarias mayores a cero y menores que 1.

Si se analizan los valores de la función para los distintos valores de "x", se llega a la conclusión, que la función nunca es negativa, por lo tanto no tiene intersección con el eje "x". Otra característica importante es que tiene una asíntota horizontal unilateral en $y = 0$; y que para valores grandes de "x" va a crecer indefinidamente. La intersección con el eje "y" es cuando $x=0$, y $y=1$.



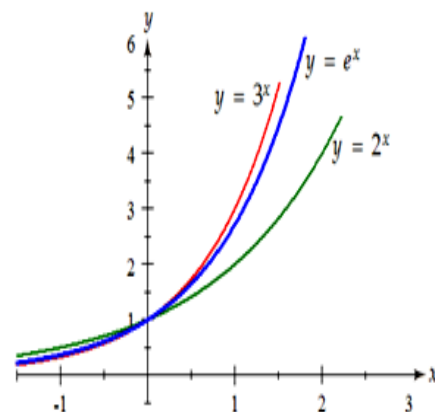
Función Logaritmo Natural.

El logaritmo natural x , denotado por $\ln(x)$, es la potencia de e necesaria para obtener x , es decir: $\ln(x) = c$ Significa $e^c = x$

De tal manera que la función logaritmo natural $f(x) = \ln(x)$ no está definida para valores negativos de x ni para $x=0$. Es una función creciente para todos los valores de $x > 0$, y continua en todo su dominio.

Para operar con logaritmos necesitamos usar las siguientes propiedades:

Propiedades del logaritmo natural
1. $\ln(AB) = \ln A + \ln B$
2. $\ln\left(\frac{A}{B}\right) = \ln A - \ln B$
3. $\ln(A^p) = p \ln A$
4. $\ln e^x = x$
5. $e^{\ln x} = x$



La derivada de una función.

La derivada de una función en un punto representa una pendiente y una razón de cambio. Si $y = f(x)$ y x_0 esta en el dominio de f , entonces, por la tasa de cambio instantánea de f en x_0 se entiende el límite de la tasa promedio de cambio entre x_0 y $x_0 + \Delta x$ cuando Δx se aproxima a 0:

$$\frac{df(x_0)}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}$$

Siempre que este límite exista. Tal límite se denomina derivada de f en x_0 .

Derivada de la funciones exponencial e^x y logaritmo natural $\ln(x)$.

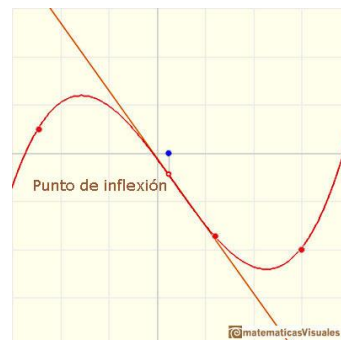
La derivada de $f(x) = a^x$, para $a > 0$ es: $\frac{d}{dx}(a^x) = (\ln a)a^x$

Pero existe un caso intermedio en el que la derivada y la función son exactamente iguales, este valor es el número e (2.7182...), esto significa que la función e^x es su propia derivada: $\frac{d}{dx}(e^x) = e^x$

Derivada de la función logaritmo natural $f(x) = \ln(x)$.

La derivada de $f(x) = \ln(x)$, para $a > 0$ es: $\frac{d}{dx} \ln(x) = \frac{1}{x}$

Un punto de inflexión es donde los valores de x de una función continua que pasa de un tipo de concavidad a otra. La curva "atraviesa" la tangente. Matemáticamente la segunda derivada de la función f en el punto de inflexión es cero, o no existe. En las funciones derivables reales de una variable real, para hallar estos puntos de inflexión, basta con igualar la segunda derivada de la función a cero y despejar.



OBJETIVOS

- Calcular experimentalmente la energía de activación de una bolsa de plástico degradable de tiendas comerciales y de una de plástico no degradable de color negro utilizada para la basura.
- Obtener la velocidad con la que se degrada la masa de las bolsas de plástico con respecto a la temperatura.
- Fomentar en la sociedad el uso de artículos degradables.
- Mostrar que la función exponencial tiene un uso importante para explicar características del comportamiento químico de objetos que utilizamos diariamente.

PROBLEMA

Determinar la energía de activación de una bolsa de plástico degradable de tiendas comerciales y de una de plástico no degradable de color negro utilizada para la basura; y así poder comparar cual se integra más rápido al ambiente.

HIPÓTESIS

La energía de activación de una bolsa de plástico degradable es menor que la energía de activación de una bolsa de plástico no degradable.

DESARROLLO

Materiales:

- Cuatro muestras de una bolsa de plástico degradable de aproximadamente 4 mg; y cuatro muestras de una bolsa de plástico no degradable de aproximadamente de 12mg.
- Una canastilla de platino.
- Analizador Termo Gravimétrico (ATG).
Marca T.A. Instruments, modelo 2950.
- Computadora.



Metodología:

Utilizando la técnica experimental del análisis termogravimétrico para determinar la cantidad de cambio en la masa que sufre una muestra, como una función de la temperatura o el tiempo, en una atmosfera controlada, se llevó a cabo el siguiente experimento:



1. Cortar 3 circulitos del mismo diámetro de una bolsa de plástico degradable con un peso total aproximado de 4 mg; y cortar otros 3 circulitos de la bolsa no degradable de aproximadamente 12 mg.



2. Se quema la canastilla de platino para que esté completamente limpia y no se alteren los resultados de la muestra.
3. Es necesario tarar el ATG, es decir, se requiere que el equipo este equilibrado (en cero gramos y a temperatura ambiente).



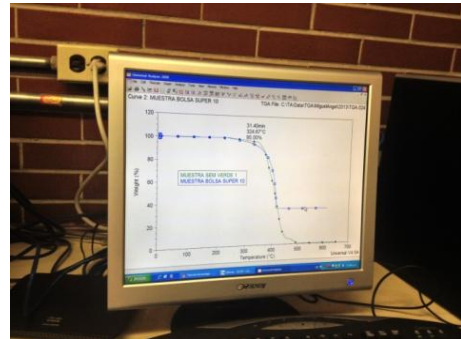
4. Se coloca la muestra en la canastilla y se introduce al ATG con una atmosfera de aire controlado de 40°C dentro del horno y 60°C la de la balanza, esto es regulado con nitrógeno líquido. Se revisa el peso y la temperatura.
5. Se calienta la muestra a una velocidad donde el horno aumenta su temperatura a 1°C/min, hasta alcanzar una temperatura de 500°C.



6. La computadora recaba los datos de cómo la muestra va perdiendo masa conforme aumenta la temperatura. Una vez alcanzada ésta temperatura se espera a que el horno se enfríe y se retiran los desechos.



7. Se repite el procedimiento en 3 ocasiones para la bolsa degradable, variando la velocidad a la que aumenta la temperatura a: 2°C/min, 5°C/min y 10°C/min, y para la bolsa no degradable a: 1°C/min, 2°C/min, 5°C/min y 20°C/min.



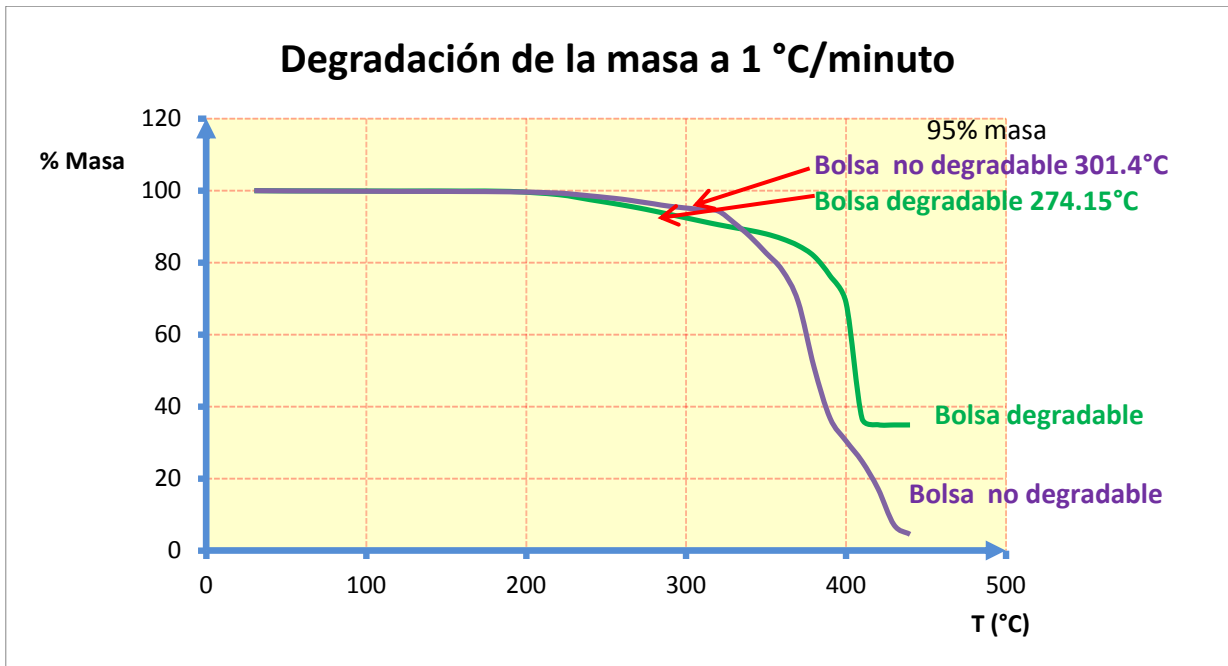
RESULTADOS

A continuación se presentan por medio de tablas y sus correspondientes gráficas, los resultados obtenidos en el ANALIZADOR TERMOGRAVIMÉTRICO (ATG), que muestran la variación de la descomposición de la masa de una bolsa de plástico degradable de tiendas comerciales y de una bolsa de plástico no degradable de color negro utilizada para la basura, en función de la temperatura. Se fijó un valor de porcentaje de pérdida de masa constante para todas las curvas, en este caso fue de 5% de la masa. En las gráficas también aparece la temperatura a la que pierde este valor. Cada muestra de la bolsa de plástico degradable fue calentada dentro del horno del (ATG) a cuatro velocidades de calentamiento de: 1, 2, 5 y 10 (°C/min). Y para la bolsa de plástico no degradable a las velocidades de calentamiento de: 1, 2, 5 y 20 (°C/min).

Resultados de las bolsas de plástico calentadas a una velocidad de 1°C/min.

Bolsa degradable			
Temperatura °C	Masa %	Temperatura °C	Masa %
0		280	94.31
5		290	93.36
10		310	91.46
30	99.97	320	90.54
50	99.92	330	89.72
70	99.9	340	88.91
90	99.89	350	87.96
120	99.86	360	86.62
140	99.88	370	84.74
160	99.85	380	81.78
190	99.76	390	76.33
220	98.88	400	68.84
240	97.46	410	36.72
250	96.75	420	35
260	96	430	34.94
270	95.2	440	34.94

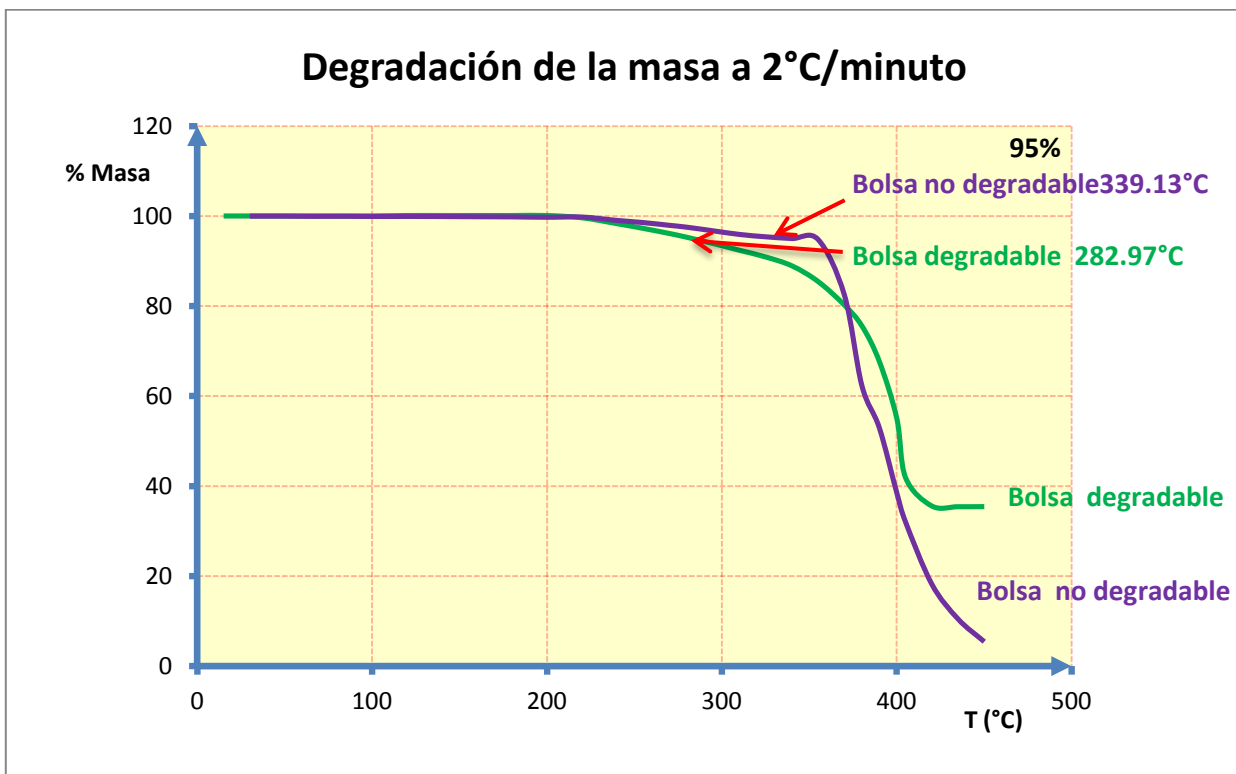
Bolsa no degradable			
Temperatura °C	Masa %	Temperatura °C	Masa %
0		255	97.82
5		270	96.96
10		280	96.31
15		295	95.35
30	99.98	310	94.72
50	99.92	325	92.81
65	99.9	340	87.23
85	99.86	355	80.17
100	99.85	370	69.18
120	99.79	380	50.88
140	99.78	390	36.75
160	99.75	400	30.43
180	99.68	405	27.42
200	99.62	420	17.13
220	99.31	435	5.09
240	98.53	450	4.343



Resultados de las bolsas de plástico calentadas a una velocidad de 2°C/min.

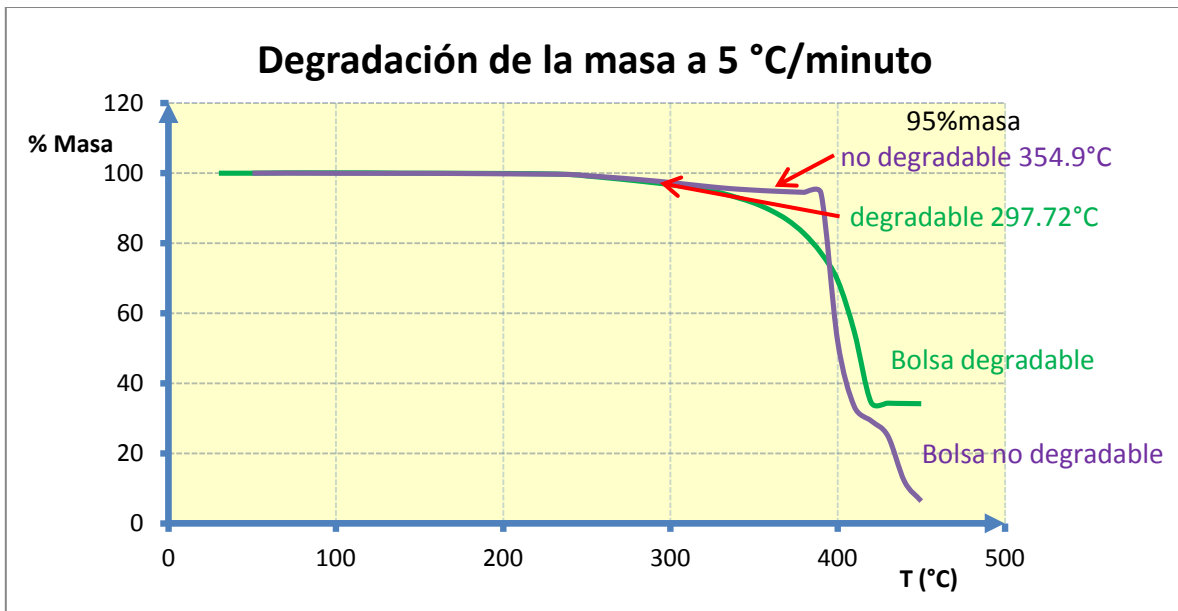
Bolsa degradable			
Temperatura °C	Masa %	Temperatura °C	Masa %
0		255	97.24
5		270	96.1
10		280	95.26
15	100	295	93.88
30	100	310	92.38
50	100	325	90.89
65	100	340	88.92
85	100	355	85.43
100	100	370	80.21
120	100.1	380	75.58
140	100.1	390	67.67
160	100.1	400	54.99
180	100.1	405	41.86
200	100.1	420	35.57
220	99.6	435	35.41
240	98.29	450	35.43

Bolsa no degradable			
Temperatura °C	Masa %	Temperatura °C	Masa %
0		255	98.52
5		270	97.91
10		280	97.49
15		295	96.69
30	99.95	310	95.89
50	99.95	325	95.36
65	99.91	340	88.92
85	99.92	355	94.75
100	99.88	370	82.45
120	99.89	380	62.32
140	99.86	390	52.93
160	99.82	400	38.47
180	99.79	405	32.02
200	99.7	420	18.23
220	99.75	435	10.5
240	99	450	5.452



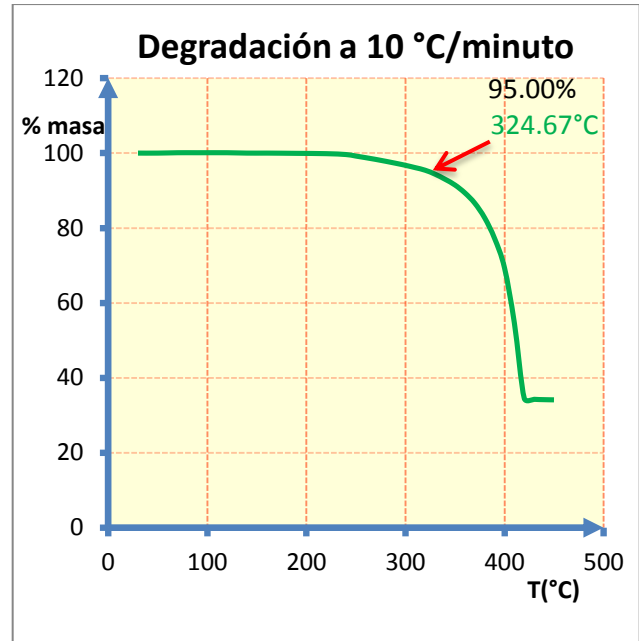
Resultados de las bolsas de plástico calentadas a una velocidad de 5°C/min.

Bolsa degradable				Bolsa no degradable			
Temperatura °C	Masa %	Temperatura °C	Masa %	Temperatura °C	Masa %	Temperatura °C	Masa %
0		300	96.74	0		300	97.3
5		310	96.12	5		310	96.79
10		320	95.43	10		320	96.28
30	100	330	94.37	30		330	95.8
50	100	340	93.03	50	99.97	340	95.42
70	100.1	350	91.49	70	99.98	350	95.13
90	100.1	360	89.39	90	99.95	360	94.88
120	100.1	370	86.64	120	99.92	370	94.68
140	100	380	82.72	140	99.93	380	94.5
160	100	390	77.24	160	99.91	390	94.34
190	99.94	400	69.41	190	99.82	400	52.03
220	99.85	410	54.66	220	99.72	410	33.32
240	99.62	420	34.53	240	99.6	420	29.31
250	99.21	430	34.29	250	99.25	430	25.01
270	98.32	440	34.2	270	98.57	440	11.97
290	97.3	450	34.15	290	97.77	450	6.379



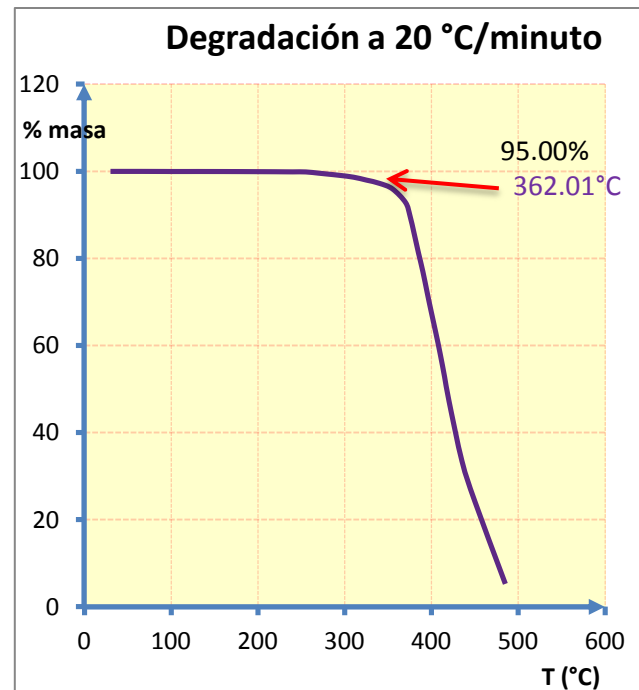
Resultados de la bolsa degradable calentada a una velocidad de 10°C/min.

Bolsa degradable			
Temperatura °C	Masa %	Temperatura °C	Masa %
0		300	96.74
5		310	96.12
10		320	95.43
30	100	330	94.37
50	100	340	93.03
70	100.1	350	91.49
90	100.1	360	89.39
120	100.1	370	86.64
140	100	380	82.72
160	100	390	77.24
190	99.94	400	69.41
220	99.85	410	54.66
240	99.62	420	34.53
250	99.21	430	34.29
270	98.32	440	34.2
290	97.3	450	34.15



Resultados de la bolsa degradable calentada a una velocidad de 20°C/min.

Bolsa no degradable			
Temperatura °C	Masa %	Temperatura °C	Masa %
0		295	99.07
5		310	98.67
10		325	98
15		340	97.25
30	100	355	95.97
50	100	370	92.85
100	99.98	385	81.19
120	99.98	390	76.95
140	99.98	395	72.09
160	99.97	400	67.37
180	99.96	405	62.82
200	99.94	410	58
220	99.92	415	52.76
240	99.89	420	47.29
255	99.88	435	33.44
270	99.59	450	24.11
280	99.39	485	5.238



OBTENCIÓN DE LA ENERGÍA DE ACTIVACIÓN (Ea) Y DEL FACTOR DE FRECUENCIA (A).

En la tabla resumimos la información para la bolsa de plástico degradable.

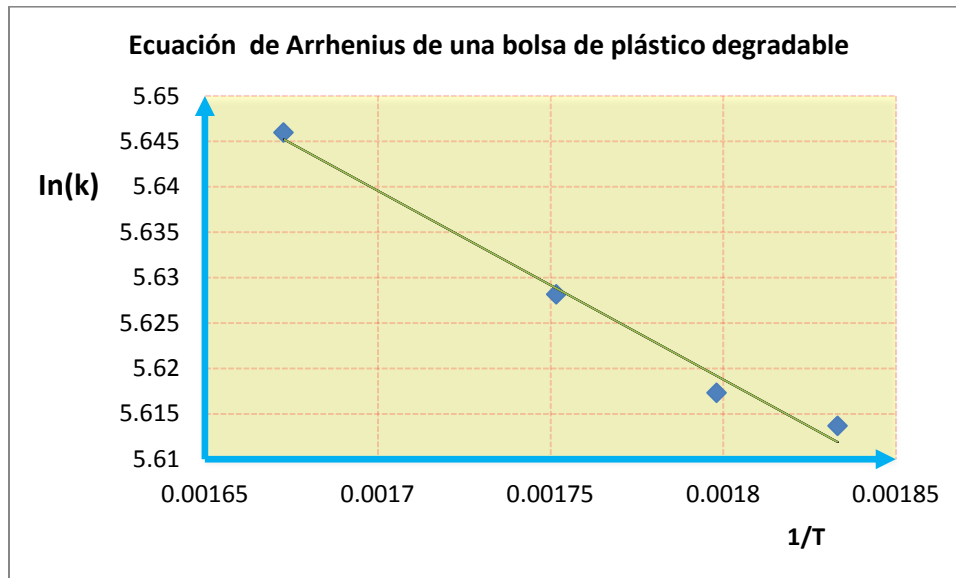
Velocidad (k) $\frac{^{\circ}\text{C}}{\text{min}}$	Temperatura (T) $^{\circ}\text{C}$	Velocidad(k) $\frac{\text{K}}{\text{min}}$	Temperatura(T) K	$1/T$ K^{-1}	$\ln(k)$
1	272.36	274.15	545.51	0.001833146963	5.61367540185
2	282.97	275.15	556.12	0.0017981173056	5.61731640351
5	297.72	278.15	570.87	0.001751712299	5.62816053652
10	324.67	283.15°	597.82	0.001672744304	5.64597679256

Para obtener la ecuación de Arrhenius en forma lineal, elaboramos la siguiente tabla, tomando los valores de las dos últimas columnas de la tabla anterior:

$x = \frac{1}{T} \text{ K}^{-1}$	$y = \ln(k)$
0.001833146963	5.61367540185
0.0017981173056	5.61731640351
0.001751712299	5.62816053652
0.001672744304	5.64597679256

Al graficar $\ln(k)$ en función de $\frac{1}{T} \text{ K}^{-1}$, se observa que los datos tienden a ser un recta, sin embargo debido a la dispersión y a la variabilidad de esto, por el método de mínimos cuadrados buscamos la ecuación de la recta que mejor se ajuste a los datos.

Grafica que muestra la variación de ln(k) en función de 1/T (K)



Método de mínimos cuadrados

$$y = mx + b \quad ; \quad \ln(k) = \frac{-E_a}{R} \left(\frac{1}{T^{\circ}K} \right) + \ln A \quad \text{donde } m = -E_a/R \quad \text{y} \quad b = \ln(A)$$

Con el método de mínimos cuadrados podemos determinar la pendiente y la ordenada al origen con las siguientes formulas.

$$m = \frac{n \sum xy - \sum x \sum y}{n \sum x^2 - (\sum x)^2} \quad b = \frac{\sum y - m \sum x}{n}$$

Para n= 4:

$$\sum xy = 0.03969479; \quad \sum x = 0.00705577; \quad \sum y = 22.50512913; \quad \sum(x)^2 = 0.00004978$$

$$\text{y } \sum x^2 = 0.00001246$$

Sustituyendo los valores en **m**, se tiene:

$$m = \frac{4 (0.03969479) - (0.00705577) (22.50512913)}{4 (0.00001246) - (0.00705577)^2} = \frac{0.15877917 - 0.15879116}{0.00004984 - 0.00004978}$$

$$m = \frac{-0.00001199}{0.000000061} = -207.8251784$$

Por lo que la pendiente es igual a: **m = -207.82517874**

Sustituyendo los valores en “b” se tiene

$$b = \frac{(22.50512913) - (-207.82517874) (0.00705577)}{4}$$

$$= \frac{(22.50512913) + (1.46636666)}{4}$$

$$b = \frac{(23.97149579)}{4} = 5.99287429$$

Por lo que la ordenada al origen es igual a: **b= 5.99287429**

La ecuación de la recta es: **$y = -207.82517874 x + 5.99287429$**

Comparando con: $\ln(K) = \frac{-E_a}{R} \left(\frac{1}{T}\right) + \ln(A)$

Para encontrar la energía de activación, hacemos que $m = \frac{-E_a}{R}$.

Sustituyendo $R = 8.3143$ (Constante) se tiene **$-207.82517874 = \frac{-E_a}{8.3143}$**

Es decir **$-E_a = -207.82517874(8.3143)$**

Por lo tanto **$E_a = 1727.9208836 \frac{J}{mol}$ (Energía de activación)**

Para encontrar el factor de frecuencia **A**, hacemos que $b = \ln(A)$

$5.99287429 = \ln(A)$; $e^{5.99287429} = A$

Por lo tanto **$A = 400.56429481 \text{ min}^{-1}$ (frecuencia de las colisiones entre las moléculas reactivas)**

Resultados del ANALIZADOR TERMOGRAVIMÉTRICO (ATG) para la muestra de la bolsa no degradable.

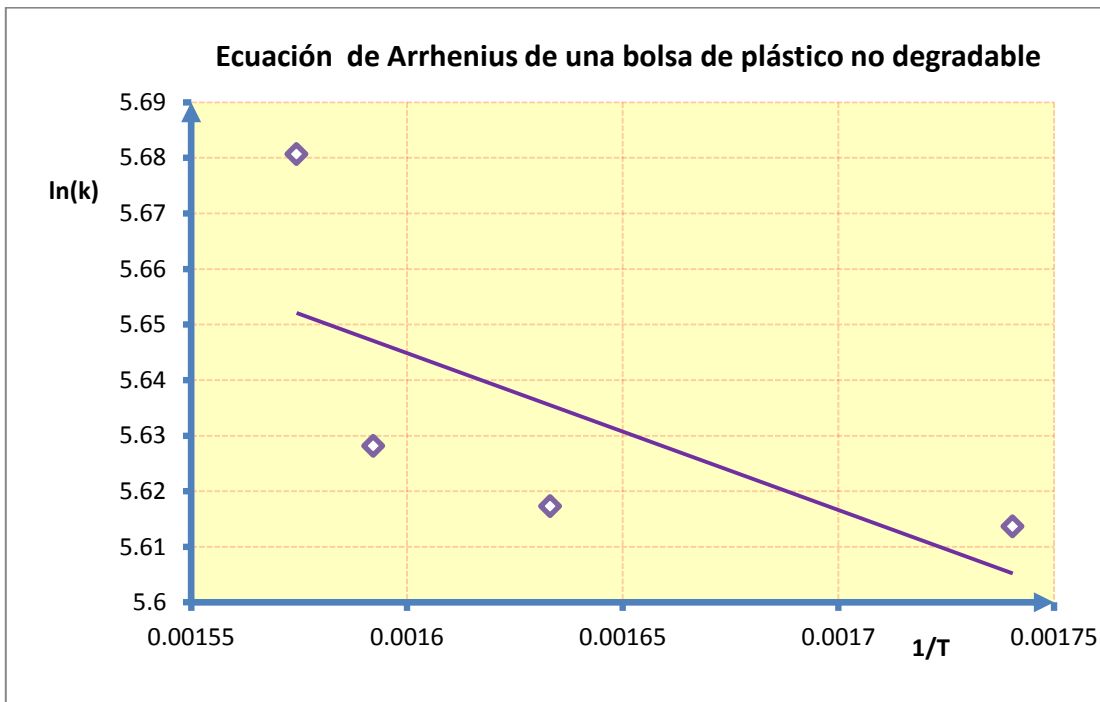
En la tabla resumimos la información para la bolsa de plástico no degradable.

Velocidad (k) $\frac{^{\circ}C}{min}$	Temperatura (T) °C	Velocidad (k) $\frac{K}{min}$	Temperatura(T)K	$\frac{1}{T}$ K^{-1}	ln k
1	301.40	274.15	574.55	0.0017404	5.61367
2	339.13	275.15	612.28	0.0016332	5.61731
5	354.90	278.15	628.05	0.0015922	5.62816
20	362.01	293.15	635.16	0.0015744	5.68068

Para obtener la ecuación de Arrhenius en forma lineal, elaboramos la siguiente tabla, tomando los valores de las dos últimas columnas de la tabla anterior:

$x = \frac{1}{T} \text{ K}^{-1}$	$y = \ln(k)$	x	x^2
0.0017404	5.61367	0.0097770031	0.00000302899
0.0016332	5.61731	0.009174191	0.00000266734
0.0015922	5.62816	0.008961156	0.0000025351
0.0015744	5.68068	0.008943663	0.00000247873
Totales=0.0065402	22.53982	0.036849041	0.00001071016

Por el método de mínimos cuadrados buscamos la ecuación de la recta que mejor se ajuste a los datos.



Método de mínimos cuadrados

Teniendo el modelo de recta $\hat{y} = mx + b$ necesitamos obtener los valores de **m** y de **b** de la ecuación de Arrhenius en forma lineal:

$$\ln(k) = \frac{-Ea}{R} \left(\frac{1}{T^{\circ}\text{K}} \right) + \ln A \quad \text{donde} \quad m = -Ea/R \quad y \quad b = \ln(A)$$

Con el método de mínimos cuadrados podemos determinar la pendiente y la ordenada al origen con las siguientes fórmulas.

$$m = \frac{n \sum xy - \sum x \sum y}{n \sum x^2 - (\sum x)^2} \quad b = \frac{\sum y - m \sum x}{n}$$

Para $n=4$

$\sum xy = 0.036849041$; $\sum x = 0.0065402$; $\sum y = 22.53982$; $\sum(x)^2 = 0.00004277421$
y $\sum x^2 = 0.00001071016$.

Sustituyendo en m :

$$\begin{aligned} m &= \frac{4(0.036849041) - (0.0065402)(22.53982)}{4(0.00001071016) - (0.00004277421)} = \frac{0.147396164 - 0.1474149308}{0.00004284064 - 0.00004277421} \\ &= \frac{-0.0000187668}{0.00000006643} = -282.5048924 \end{aligned}$$

Ahora sustituyendo los valores de b :

$$\begin{aligned} b &= \frac{22.53982 - (-282.5048924)(0.0065402)}{4} = \frac{22.53982 + 1.8476384}{4} \\ &= \frac{24.3874584}{4} = 6.0968646 \end{aligned}$$

La ecuación de la recta de regresión es: $\hat{y} = -282.5048924 x + 6.0968646$

Comparando con: $\ln(K) = \frac{-E_a}{R} \left(\frac{1}{T}\right) + \ln(A)$

Para encontrar la energía de activación, hacemos que $m = \frac{-E_a}{R}$.

Sustituyendo $R = 8.3143$ (Constante) se tiene $-282.5048924 = \frac{-E_a}{8.3143}$

Es decir $-E_a = -282.5048924(8.3143)$

Por lo tanto $E_a = 2348.830427 \frac{J}{mol}$ (**Energía de activación**)

Para encontrar el factor de frecuencia **A**, hacemos que $b = \ln(A)$

$6.0968646 = \ln(A)$; $e^{6.0968646} = A$

Por lo tanto **A = 444.4620169** (**frecuencia de las colisiones entre las moléculas reactivas**).

Comentario. Comparando las energías, observamos que la energía de activación de una bolsa de plástico degradable ($E_a = 1727.9208836 \frac{J}{mol}$) es menor que la de una bolsa de plástico no degradable ($E_a = 2348.830427 \frac{J}{mol}$).

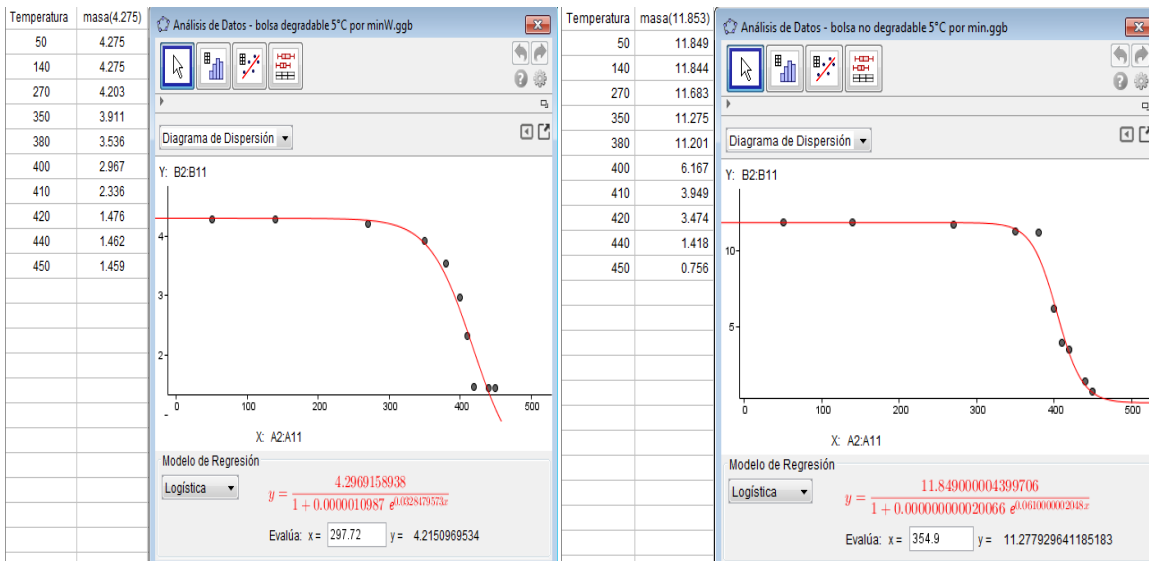
LA FUNCIÓN EXPONENCIAL COMO MODELO DEL COMPORTAMIENTO DE LA DEGRADACION DE LA MASA DE LA BOLSAS DE PLASTICO CON RESPECTO A LA TEMPERATURA.

Los resultados del análisis termogravimétrico (ATG), muestran las gráficas de la degradación de la masa de la muestras con respecto a la temperatura. La forma de variación que aparece en las curvas tiene la característica de funciones exponenciales de la forma $f(x) = \frac{A}{1+Be^{cx}}$, esta afirmación se puede observar en el siguiente apartado, en donde se estudia la velocidad de degradación de la masa.

LA VELOCIDAD CON LA QUE SE DEGRADA LA MASA CON RESPECTO A LA TEMPERATURA.

Para realizar el estudio de la velocidad de degradación de la masa f (en mg) con respecto a la temperatura x (en °C), se elaboró la gráfica del comportamiento de la masa de la bolsa de plástico degradable (aprox. 4 mg), y de la masa de la bolsa de plástico no degradable (aprox. 12 mg) cuando el horno del Analizador (ATG) calienta la muestra con una velocidad de 5°C/min, como se muestra en las siguientes gráficas.

Gráfica de la degradación de la masa con la temperatura.



En las gráficas se observa que la función exponencial:

$$f(x) = \frac{4.2969158938}{1+0.0000010987e^{0.0328479573x}} \quad \text{Bolsa degradable}$$

$$f(x) = \frac{11.849000004399706}{1+0.00000000020066e^{0.0610000002048x}} \quad \text{Bolsa no degradable}$$

Modelan el comportamiento de la masa de la bolsa con respecto a la temperatura. Ahora por cuestiones de facilidad en los cálculos designemos por una letra a cada uno de los valores numéricos que aparecen en la función, de la siguiente manera:

$$A = 4.2969158938 ; B = 0.0000010987 \quad y \quad C = 0.0328479573 \quad \text{Bolsa degradable}$$

$$A = 11.849000004399706 ; B = 0.00000000020066 \quad y \quad C = 0.0610000002048$$

Bolsa no degradable

Es decir la variación de la masa f con respecto a la temperatura x , es una función de la forma:

$$f(x) = \frac{A}{1 + Be^{Cx}} \quad \text{Donde:} \quad \begin{array}{l} x \text{ es la temperatura en } ^\circ\text{C} \\ f \text{ es la masa de la bolsa en miligramos} \end{array}$$

La velocidad instantánea con la que cambia la masa con respecto a la temperatura la obtenemos derivando $f(x)$:

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{(1 + Be^{Cx}) \frac{dA}{dx} - A \frac{d(1 + Be^{Cx})}{dx}}{(1 + Be^{Cx})^2}$$

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{-A B C e^{Cx}}{(1 + Be^{Cx})^2}$$

Sustituyendo los valores de A, B y C se tiene:

Velocidad de degradación

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{-(0.000000155)e^{0.0328479573x}}{(1 + 0.0000010987 e^{0.0328479573x})^2} \quad \frac{mg}{^\circ\text{C}} \quad \text{bolsa degradable}$$

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{-(0.000000000145)e^{0.06100000020066x}}{(1 + 0.00000000020066 e^{0.06100000020066x})^2} \quad \frac{mg}{^\circ\text{C}} \quad \text{bolsa no degradable}$$

La variación de la velocidad instantánea con la que cambia la masa con respecto a la temperatura la podemos observar en la siguiente tabla:

Temperatura x en $^{\circ}\text{C}$	Velocidad $f'(x)$ en $\text{mg}/^{\circ}\text{C}$ Bolsa degradable	Velocidad $f'(x)$ en $\text{mg}/^{\circ}\text{C}$ Bolsa no degradable
200	-1.1×10^{-4}	-2.88×10^{-6}
250	-5.66×10^{-4}	-6.08×10^{-5}
300	-2.83×10^{-3}	-1.28×10^{-3}
350	-1.24×10^{-2}	-2.52×10^{-2}
400	-3.24×10^{-2}	-1.78×10^{-1}
410	-3.47×10^{-2}	-1.74×10^{-1}
420	-3.32×10^{-2}	-1.42×10^{-1}
450	-2.69×10^{-2}	-3.84×10^{-2}
500	-8.3×10^{-3}	-2.03×10^{-3}

En la tabla se observa que aproximadamente en $x = 410^{\circ}\text{C}$, está el valor máximo de la velocidad para la bolsa degradable y en $x = 400^{\circ}\text{C}$ para la bolsa no degradable. Esta cantidad, nos indica el investigador, es un aspecto importante en este tipo de problemas, por lo que para calcular este valor, obtenemos la segunda derivada de $f(x)$ (primera coordenada del punto de inflexión):

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2} = \frac{(1 + Be^{Cx})^2 \left(\frac{d - ABCe^{Cx}}{dx} \right) - (-ABCe^{Cx}) \frac{d(1 + Be^{Cx})^2}{dx}}{(1 + Be^{Cx})^4}$$

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2} = \frac{(1 + Be^{Cx})^2 (-ABC^2e^{Cx}) - (-ABCe^{Cx}) [2(1 + Be^{Cx})(Be^{Cx})]}{(1 + Be^{Cx})^4}$$

Factorizando:

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2} = \frac{(1 + Be^{Cx})e^{Cx} [-(1 + Be^{Cx}) ABC^2 + 2AB^2C^2e^{Cx}]}{(1 + Be^{Cx})^4}$$

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2} = \frac{(1 + Be^{Cx})e^{Cx} [-ABC^2 - AB^2C^2e^{Cx} + 2AB^2C^2e^{Cx}]}{(1 + Be^{Cx})^4}$$

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2} = \frac{ABC^2e^{Cx} [-1 + Be^{Cx}]}{(1 + Be^{Cx})^3}$$

Igualando $\frac{d^2f(x)}{dx^2} = 0$

$$\frac{ABC^2e^{Cx} [-1 + Be^{Cx}]}{(1 + Be^{Cx})^3} = 0$$

$$ABC^2 e^{Cx} [-1 + Be^{Cx}] = 0$$

Analizando los factores: e^{Cx} y $(-1 + Be^{Cx})$ se tiene:

1. $e^{Cx} = 0$; $\ln(0) = Cx$; pero como $\ln(0)$ no está definido en $x=0$, entonces no existe un valor de x que cumpla con la condición
2. $-1 + Be^{Cx} = 0$; $Be^{Cx} = 1$; $e^{Cx} = \frac{1}{B}$; $\ln\left(\frac{1}{B}\right) = Cx$ entonces:

$$x = \frac{\ln\left(\frac{1}{B}\right)}{C} \quad \text{temperatura en la cual la velocidad es máxima}$$

Sustituyendo los valores de B y C se tiene:

$$\text{Para la bolsa degradable } x = \frac{\ln\left(\frac{1}{0.0000010987}\right)}{0.0328479573} = \frac{13.721}{0.0328479573} = 417.724$$

$$x = 417.724 \text{ } ^\circ\text{C} \quad \text{temperatura en la cual la velocidad es máxima}$$

La velocidad máxima de degradación de la masa de la bolsa degradable es:

$$f'(417.724) = -3.52 \times 10^{-2} \frac{mg}{^\circ\text{C}}$$

$$\text{Para la bolsa no degradable } x = \frac{\ln\left(\frac{1}{0.000000000020066}\right)}{0.0610000002048} = \frac{24.631}{0.0610000002048} = 403.803$$

$$x = 403.803 \text{ } ^\circ\text{C} \quad \text{temperatura en la cual la velocidad es máxima}$$

La velocidad máxima de degradación de la masa de la bolsa no degradable es:

$$f'(403.803) = -1.8 \times 10^{-1} \frac{mg}{^\circ\text{C}}$$

CONCLUSIONES

- La investigación mostró que la energía de activación de una bolsa de plástico degradable es menor que la de una bolsa de plástico no degradable.
- El estudio experimental evidenció que la función exponencial modela el comportamiento de pérdida de masa de una bolsa de plástico cuando la temperatura aumenta.

- Se encontró que la velocidad de degradación de la masa de la bolsa de plástico degradable alcanza su valor máximo a la temperatura de $417.724\text{ }^{\circ}\text{C}$ y la de bolsa de plástico no degradable a $403.803\text{ }^{\circ}\text{C}$.
- Con los resultados obtenidos se puede decir que la presencia de aditivos como el almidón en la elaboración de las bolsas de plástico, posibilita acelerar el proceso de degradación, de manera que puedan ser metabolizadas por microorganismos para asimilarse más rápido al medio ambiente y así disminuir la contaminación que existe en nuestro país.

Fuentes de información consultadas.

Atkins, Peter y De Paula, Julio. Química Física. Cinética química empírica. Editorial Médica. Panamericana. México, 2008, pp. 794-798.

Ayres, Frank. y Mendelson, Elliot. Cálculo, "La derivada", Mc Graw Hill, México, 2010, pp. 72.

Castanedo, Ma. De los Ángeles. Química Orgánica. "Polímeros". México, Mc Graw Hill Interamericana, 2004, pp.47-50.

Chang, Raymond, et.al. Física Química. "La ecuación de Arrhenius". Mc Graw Hill Interamericana, México, 2008, pp. 470-472.

Engels, Thomas, et.al. Química Física. "Superficies de energía potencial y Termodinámica", "Superficies de energía potencial y cinética". Addison Wesley, España, 2006, pp.346-350.

Granville, Smith y Longley. Cálculo Diferencial e Integral, Editorial UTEHA, México, 1972, pp.108-111.

Hughes-Hallet, Deborah, et.al. Calculo Aplicado. "Funciones exponenciales", "Logaritmo Natural", México, Editorial Continental, 2004, pp. 32-39.

Mendoza, Ramón. Las funciones matemáticas elementales: trigonométricas, exponenciales, logarítmicas, hiperbólicas. "Funciones exponenciales y funciones logarítmicas", México, Trillas, 1990, pp. 155-169.

Vázquez, Alethia. ¿Es adecuado el manejo de plásticos biodegradables en México? Investigación y Desarrollo, periódico La Jornada, México, septiembre 2013.