



Los alumnos deben llenar esta hoja y entregarla al supervisor junto con la versión final de su monografía.

Número de convocatoria del alumno

Nombre y apellido(s) del alumno

Nombre del colegio

Convocatoria de exámenes (mayo o noviembre)

MAYO

Año

2015

Asignatura del Programa del Diploma en la que se ha inscrito la monografía:

QUÍMICA (NM)

(En el caso de una monografía en lenguas, señale si se trata del Grupo 1 o el Grupo 2.)

Título de la monografía:

INVESTIGACIÓN SOBRE LA EFICACIA DE
DETERMINADAS SUSTANCIAS COMO CATALIZADORES EN LA
REACCIÓN DE DESCOMPOSICIÓN DEL PERÓXIDO DE HIDRÓGENO

Declaración del alumno

El alumno debe firmar esta declaración; de lo contrario, la calificación asignada será cero.

Confirmando que soy el autor de este trabajo y que no he recibido más ayuda que la permitida por el Bachillerato Internacional.

He citado debidamente las palabras, ideas o gráficos de otra persona, se hayan expresado estos de forma escrita, oral o visual.

Sé que el máximo de palabras permitido para las monografías es 4.000, y que a los examinadores no se les pide que lean monografías que superen ese límite.

Esta es la versión final de mi monografía.

Firma del alumno: _____

Fecha: 03-03-2015

Informe y declaración del supervisor

El supervisor debe completar este informe, firmar la declaración y luego entregar esta portada junto con la versión final de la monografía al coordinador del Programa del Diploma.

Nombre y apellido(s) del supervisor [MAYÚSCULAS]: _____

Si lo considera adecuado, escriba algunos comentarios sobre el contexto en que el alumno desarrolló la investigación, las dificultades que encontró y cómo las ha superado (ver página 13 de la guía para la monografía). La entrevista final con el alumno puede ofrecer información útil. Estos comentarios pueden ayudar al examinador a conceder un nivel de logro para el criterio K (valoración global). No escriba comentarios sobre circunstancias adversas personales que puedan haber afectado al alumno. En el caso en que el número de horas dedicadas a la discusión de la monografía con el alumno sea cero, debe explicarse este hecho indicando cómo se ha podido garantizar la autoría original del alumno. Puede adjuntar una hoja adicional si necesita más espacio para escribir sus comentarios.

El alumno ha trabajado con mucha paciencia, durante mucho tiempo y con pocos medios, en la obtención del oxígeno molecular mediante la catálisis del peróxido de hidrógeno. Buscaba un método eficaz y barato para degradar la materia orgánica de las efués residuales.

Se puede decir que no sólo lo ha encontrado, sino que también nos indica en sus conclusiones las limitaciones del método utilizado, da una razón por la cual algunos elementos de transición son buenos catalizadores y propone cómo continuar con la investigación.

El trabajo está bien estructurado, aborda un problema de investigación de manera eficaz y es coherente con las exigencias establecidas en la monografía.

El supervisor debe firmar esta declaración; de lo contrario, la calificación asignada será cero.

He leído la versión final de la monografía, la cual será entregada al examinador.

A mi leal saber y entender, la monografía es el trabajo auténtico del alumno.

Como se indica en la sección "Responsabilidades del supervisor" de la guía de la Monografía, se recomienda dedicar entre tres y cinco horas a cada alumno. Se contactará a los colegios cuando el número de horas dedicadas se deje en blanco, o cuando se indiquen cero horas y no se incluya una justificación. También se contactará a los colegios en caso de que el número de horas dedicadas sea excesivo en comparación con la cantidad de tiempo recomendada.

He dedicado horas a discutir con el alumno su progreso en la realización de la monografía.

Firma del supervisor: _____

Fecha: 03-03-2015

Formulario de evaluación (para uso exclusivo del examinador)

Número de convocatoria del alumno		
-----------------------------------	--	--

Criterios de evaluación	Nivel de logro					
	Examinador 1	Máximo	Examinador 2	Máximo	Examinador 3	
A Formulación del problema de investigación	1	2	<input type="text"/>	2	<input type="text"/>	
B Introducción	2	2	<input type="text"/>	2	<input type="text"/>	
C Investigación	2	4	<input type="text"/>	4	<input type="text"/>	
D Conocimiento y comprensión del tema	2	4	<input type="text"/>	4	<input type="text"/>	
E Argumento razonado	3	4	<input type="text"/>	4	<input type="text"/>	
F Aplicación de habilidades de análisis y evaluación apropiadas para la asignatura	2	4	<input type="text"/>	4	<input type="text"/>	
G Uso de un lenguaje apropiado para la asignatura	3	4	<input type="text"/>	4	<input type="text"/>	
H Conclusión	2	2	<input type="text"/>	2	<input type="text"/>	
I Presentación formal	2	4	<input type="text"/>	4	<input type="text"/>	
J Resumen	1	2	<input type="text"/>	2	<input type="text"/>	
K Valoración global	3	4	<input type="text"/>	4	<input type="text"/>	
Total (máximo 36)	<input style="width: 40px; height: 20px;" type="text" value="23"/>		<input style="width: 40px; height: 20px;" type="text"/>		<input style="width: 40px; height: 20px;" type="text"/>	

Nombre del examinador 1: _____
[MAYÚSCULAS]

Número de examinador: _____

Nombre del examinador 2: _____
[MAYÚSCULAS]

Número de examinador: _____

Nombre del examinador 3: _____
[MAYÚSCULAS]

Número de examinador: _____

Para uso exclusivo del centro de evaluación del IB: B: _____

Para uso exclusivo del centro de evaluación del IB: A: _____

INVESTIGACIÓN SOBRE LA EFICACIA DE
DETERMINADAS SUSTANCIAS COMO
CATALIZADORES EN LA REACCIÓN DE
DESCOMPOSICIÓN DEL PERÓXIDO DE
HIDRÓGENO

Monografía de Química

Convocatoria: Mayo de 2015

Total de palabras: 3969

Resumen

Este trabajo presenta un estudio para degradar las materias orgánicas de las aguas contaminadas, mediante el empleo del oxígeno molecular obtenido por la catálisis del agua oxigenada.

El O_2 obtenido de su descomposición es el oxidante más limpio desde el punto de vista medioambiental, ya que aumenta la biodegradabilidad del efluente, y al no ser biocida, su adición al flujo residual, no distorsiona el posterior tratamiento biológico.

El objetivo de este estudio ha sido optimizar la descomposición del peróxido de hidrógeno mediante la selección del catalizador más adecuado. Tanto el peróxido de hidrógeno del 3%, como los catalizadores utilizados, son eficaces, de bajo coste y de toxicidad nula.

Los catalizadores estudiados, tanto en procesos de catálisis homogéneos como heterogéneos, fueron principalmente sales de los elementos de transición. En esta investigación se ha tratado establecer una relación entre su eficacia y la capacidad de cada uno de ellos para alojar pares de electrones en orbitales atómicos "d" libres y electrones desapareados que puedan compartir con otras sustancias.

Para analizar esta eficacia se desarrolló un procedimiento experimental en el que se recogió el volumen de oxígeno desprendido mediante una probeta invertida. A partir de estos datos se han comparado los catalizadores mediante las gráficas obtenidas y haciendo referencia a los valores calculados de la vida media.

Como conclusión, se ha podido establecer satisfactoriamente la relación anteriormente mencionada entre eficacia, orbitales "d" y pares de electrones libres, ya que la mayor parte de los datos empíricos obtenidos la sustentan. Por esta misma razón y debido a lo rudimentario del método, no fue posible tomar datos de iones como el Co^{2+} y Cu^{2+} , ya que no emitían O_2 . El medio más eficaz fue el heterogéneo, y como sustancia, el hierro, en sus dos iones, fue con diferencia, el más efectivo de todos.

[297 palabras]

Índice

- 1. Introducción..... Pág. 3
- 2. Fundamento teórico..... Pág. 5
- 3. Catalizadores utilizados en la investigación..... Pág. 9
- 4. Mecanismos probable de actuación de cada catalizador.....Pág. 10
- 5. Identificación de variables.....Pág. 12
- 6. Hipótesis.....Pág. 13
- 7. Método experimental.....Pág. 13
 - 7.1. Reactivos.....Pág. 13
 - 7.2. Materiales.....Pág. 13
 - 7.3. Procedimiento.....Pág. 14
- 8. Obtención de DatosPág. 16
- 9. Procesamiento de Datos.....Pág. 23
- 10. Conclusiones.....Pág. 32
 - 10.1. Discusión de los resultados y limitaciones.....Pág. 32
 - 10.2. Evaluación.....Pág. 33
 - 10.3. Propuestas de mejora.....Pág. 34
- 11. Referencias Bibliográficas.....Pág. 35
 - 11.1. Publicaciones.....Pág. 35
 - 11.2. Páginas web.....Pág. 35
- 12. Apéndices.....Pág. 37
 - 12.1. Apéndice A: Seguridad en el laboratorio de las diferentes disoluciones (manipulación).....Pág. 37
 - 12.2. Apéndice B Gráficas: Cálculo de la vida media.....Pág. 38



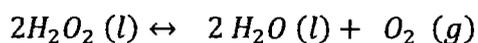
1. Introducción

El vertido de aguas residuales al mar es uno de los mayores problemas del litoral español¹, ya que ensucian la belleza de nuestras costas y provocan daños en los ecosistemas muy difíciles de reparar. Esto se debe a que las aguas contaminadas con materia orgánica biodegradable presentan generalmente muchas dificultades para su depuración. Los procesos de oxidación química constituyen una opción efectiva, rápida y económica para eliminar los contaminantes, pues con los procesos físicos de tratamiento de estas sustancias sólo se consigue transferir los contaminantes orgánicos de un medio a otro.

Dentro de los compuestos oxidantes, el peróxido de hidrógeno (H_2O_2) destaca por encima del resto como agente oxidante para tratamiento de flujos residuales; esto se debe a que presenta una serie de ventajas: potente oxidante, no selectivo, barato y ecológico, dado que los productos de su descomposición son completamente inocuos – agua y oxígeno-.

La técnica de oxidación con H_2O_2 persigue la mineralización del contaminante, es decir, su conversión en dióxido de carbono y agua. Esta técnica se conoce como oxidación húmeda y se puede definir como la oxidación de sustancias orgánicas en disolución o suspensión acuosa por el oxígeno.²

La ecuación de descomposición del H_2O_2 es la siguiente:



El O_2 obtenido de su descomposición es el oxidante más limpio desde el punto de vista medioambiental, aumenta la biodegradabilidad del efluente, y al no ser biocida, su adición al flujo residual, no distorsiona el posterior tratamiento biológico.³ Aunque la reacción es espontánea, transcurre extraordinariamente lenta⁴. En la industria, la rentabilidad y la eficacia son extraordinariamente importantes, de forma que es necesario descomponer el H_2O_2 en el menor intervalo de tiempo posible para que se degrade una gran cantidad de componentes orgánicos de la forma más económica; lo que se puede conseguir a través de los catalizadores, sustancias requeridas en la obtención del 90% de los productos químicos.⁵

En este estudio se trabajará con catalizadores inorgánicos: iones de metales de transición y el ion yoduro.

¹ Rejón R. (27 de Noviembre de 2014). *Europa tiene abiertos 800 casos de vertidos de aguas residuales sin tratar en España*. Periódico El Diario. (España)

http://www.eldiario.es/sociedad/Europa-abiertos-vertidos-residuales-Espana_0_328617844.html

² Martínez R. (2004). *Estudios Medioambientales*. Universidad Politécnica de Cataluña. España

³ Martín F., Cortijo M., C. Arrabal C., Andrés M.P. y Hermosilla D., *Tratamiento y oxidación avanzada de lixiviados de RSU*. Universidad Politécnica de Madrid. (España) P. 182

⁴ **Nota:** En condiciones normales se descomponen 100000 moléculas cada 300 años por cada mol de H_2O_2 , lo que constituye aproximadamente un 1% al año.

⁵ Ciencia en Aragón. *Catalizadores que aceleran el proceso de fabricación de nuevos fármacos*

<http://www.aragoninvestiga.org/Catalizadores-que-aceleran-el-proceso-de-fabricacion-de-nuevos-farmacos/>

Para que los iones metálicos sean útiles en el proceso de eliminación de residuos, han de cumplir los siguientes requisitos:

- i) Ser económicos, por lo que se eliminan los metales preciosos, (*Au, Pt o Ag*)
- ii) Poseer toxicidad nula en concentraciones bajas (*Cr, Cd o Hg*)
- iii) Poseer un potencial de oxidación inferior al de H_2O_2 , ya que se consumiría el catalizador en la reacción y se generaría otros productos.

A partir de ello me planteo la pregunta de investigación en la cual se centra mi trabajo:

¿Cuál es el catalizador que cumpliendo los requisitos anteriormente mencionados, descompone la mayor cantidad de H_2O_2 , es decir, cuál produce más volumen de O_2 en el menor intervalo de tiempo posible?

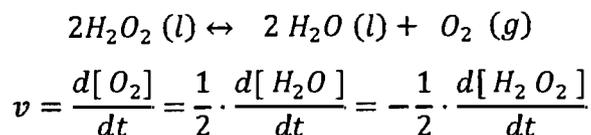
Para averiguarlo se realizará una serie de experiencias en el laboratorio, donde se medirá el grado de descomposición del H_2O_2 a partir del volumen de O_2 desprendido para cada catalizador homogéneo y heterogéneo.

*entre
cuáles?*

2. Fundamento teórico

- Cinética Química^{6 7}

La velocidad de una reacción viene dado por el número de moles de una sustancia que aparece o desaparece por unidad de tiempo y volumen. En la reacción descomposición del agua oxigenada:



De forma que al representar la concentración del O_2 en función del tiempo, podemos obtener la velocidad de la reacción con respecto al oxígeno producido o también, como el número de moles O_2 es proporcional su volumen por la ecuación de los gases ideales, si se mantiene la presión y la temperatura constante, se puede representar el volumen de oxígeno con respecto al tiempo.

De todos los factores que influyen en la velocidad de descomposición del H_2O_2 se ha decidido estudiar el uso de catalizadores, manteniendo constante los demás (naturaleza de los reactivos, la facilidad de los mismos para entrar en contacto, concentración de los reactivos y temperatura).

- Catalizadores

Los catalizadores son sustancias que modifican la velocidad de una reacción sin ser consumidos. Poseen las siguientes propiedades:

- Intervienen en el mecanismo de la reacción, pero la cantidad de catalizador se mantiene constante.
- Se usan en pequeñas cantidades para observar un incremento en la velocidad.
- No alteran el rendimiento de la reacción.
- Aumentan la velocidad de la reacción porque disminuye la energía de activación.
- No afectan al equilibrio, ya que aumentan tanto la velocidad directa como la inversa.

Según el estado en la que se encuentre el catalizador con respecto a los reactivos, podemos distinguir entre catalizadores homogéneos, cuando catalizador y reactivo están en la misma fase, o heterogéneos, cuando catalizador y reactivo están en distinta fase.

⁶Nota: La cinética química se ocupa de la rapidez con que transcurren las reacciones, así como los factores que influyen en las mismas.

⁷ González M. *Unidad Didáctica 5-2. Cinética Química*. IES Martínez Montañés. (España)

https://sites.google.com/site/fisicaquimica2bachillerato/UNIDAD%20DID%20C3%81CTICA%205_2.pdf?attr=directs=0&d=1

Tabla 1. Comparación entre algunas características de la catálisis homogénea y heterogénea

Catálisis	Homogénea	Heterogénea
Condiciones de reacción	Suaves	Severas
Separación de productos	Difícil	Fácil
Recuperación del catalizador	Caro	No requiere
Estabilidad térmica del catalizador	Baja	Alta
Tiempo de vida del catalizador	Variable	Alta
Actividad	Alta	Variable
Selectividad ⁸	Alta	Menor
Sensibilidad al envenenamiento	Baja	Alta
Determinación de propiedades estéricas y electrónicas del catalizador	Posible	Muy difícil
Determinación del mecanismo	Frecuente	Muy difícil
Problemas de difusión	Bajo	Importantes

Para explicar la acción de los catalizadores se admite que las moléculas reactantes se están modificando de algún modo, energizándose, o formando productos intermedios en las regiones próximas a la superficie del catalizador. Se han propuesto varias teorías para explicar éste comportamiento:

○ *Teoría de las colisiones⁹*

Teoría propuesta por Max Trautz y William Lewis que indica que para que se produzca una reacción química es necesario que las moléculas reaccionantes choquen entre sí, se rompan los enlaces, se forman nuevos enlaces y los productos. Las condiciones para que el choque sea eficaz son que las orientaciones de las moléculas sean adecuadas y posean la energía suficiente para originar la ruptura de los enlaces.

○ *Teoría del complejo activado o estado de transición¹⁰*

Esta teoría, supone que para que se produzca la reacción, los átomos o moléculas deben pasar a un estado activado, agrupándose en una molécula intermedia, denominada complejo activado, que se encuentra en equilibrio con las moléculas de los reactivos.

La teoría sigue la reacción por los cambios de energía potencial de los reactivos al transformarse en complejos activados, y estos, en los productos. Su evolución se representa mediante un diagrama entálpico (*véase figura 1*). En el caso de la descomposición del $H_2 O_2$, al tratarse de una reacción exotérmica, la energía potencial

⁸ **Nota:** La selectividad es la capacidad que muestra un catalizador para producir un producto deseado, generando la mínima cantidad de productos secundarios o no deseados.

⁹ Departamento de Química. *Cinética y Dinámica de las Reacciones Químicas*. Universidad de Buenos Aires.(Argentina) http://www.q1.fcen.uba.ar/materias/qf2/cinetica_2.pdf

¹⁰ Oliva C. *Teorías Cinéticas*. Universidad Autónoma de Madrid. (España) http://www.uam.es/docencia/revero00/docs/teorias_cineticas.pdf

del H_2O_2 aumenta hasta un máximo y la agrupación de átomos correspondiente a esta región cercana al máximo es lo que se denomina complejo activado.

Después del máximo, los átomos se reordenan y la energía potencial disminuye hasta alcanzar el valor característico de los productos ($O_2 + H_2O$), menor que la energía potencial característica del H_2O_2 . La diferencia de energía potencial característica entre el H_2O_2 y ($O_2 + H_2O$) es igual a la entalpía de la reacción, negativa en este caso. En el punto de máxima energía potencial (energía de activación sin catalizador), dentro de una pequeña distancia, δ , las moléculas de H_2O_2 , están muy próximas y muy distorsionadas de manera que una leve distorsión adicional las transforma en productos. A esta configuración del máximo se la denomina estado de transición de la reacción y a la energía a la que tiene lugar energía de activación.

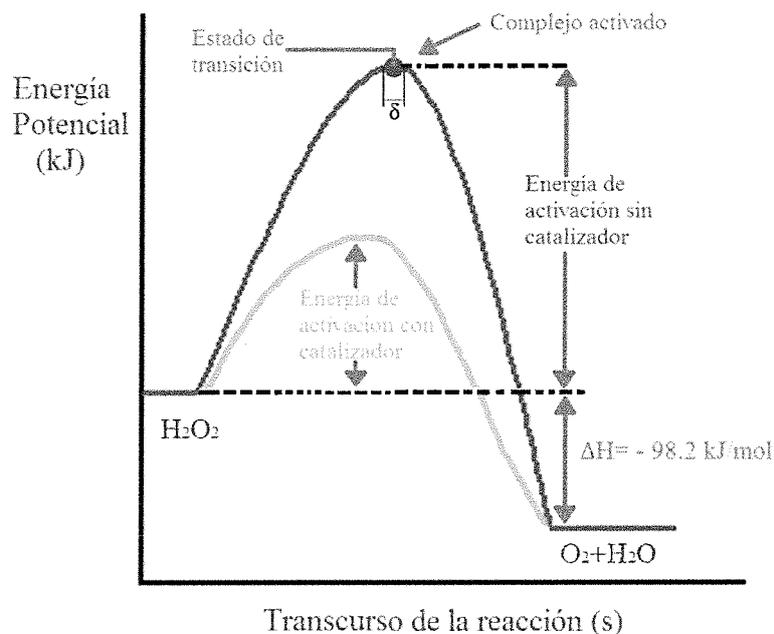


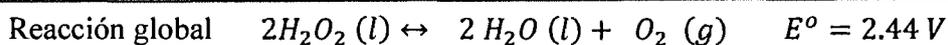
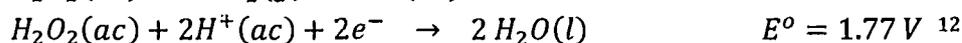
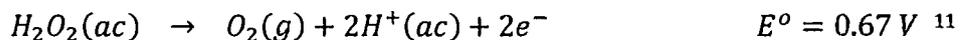
Figura 1. Diagrama entálpico para la reacción de descomposición del peróxido de hidrógeno

Si añadimos un catalizador positivo a la reacción, disminuye la energía de activación

, aumentando la velocidad de la reacción, pero sin afectar al calor de reacción o a la espontaneidad del proceso.

- Oxidación Reducción. Potenciales de oxidación

La descomposición del peróxido de hidrógeno es un proceso redox. Las semireacciones de oxidación-reducción que tiene lugar son:



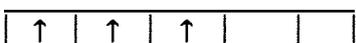
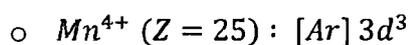
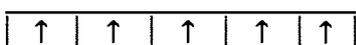
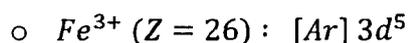
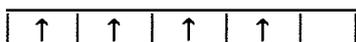
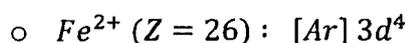
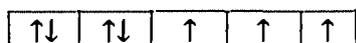
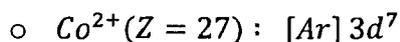
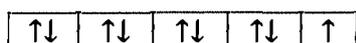
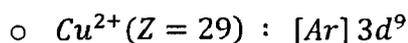
Como el potencial de la reacción global es mayor que cero, la descomposición es espontánea. Por tanto, los potenciales de reducción de todos los catalizadores utilizados deben ser menores que 2.44 V para que se obtengan solamente agua y oxígeno. Además, es importante, que los catalizadores al final de la reacción permanezcan inalterables; de ahí, que si se investigan con sales metálicas, tanto los aniones (nitratos, sulfatos o cloruros) como los cationes (potasio, sodio, hierro, cobre...), deban tener potenciales de reducción menores que el correspondiente al peróxido de hidrógeno, de forma que siempre actúen como agentes reductores.

¹¹Harris C. (2012). *Análisis químico cuantitativo*. Editorial Reverté, S.S. Barcelona (España)

¹² Fernández M.R. y Fidalgo J. A. (1995). *Química General*. Editorial Everest, S.A. León (España)

3. Catalizadores utilizados en la investigación

Se trabajará con el ion yoduro, aunque principalmente se quiere investigar las sales de los elementos de transición porque en el proceso de interacción de iones metálicos en la catálisis es fundamental su capacidad para alojar pares de electrones en orbitales atómicos “d” libres, además de tener electrones desapareados que puedan compartir con otras sustancias. Se cree que se favorece la producción de oxígeno, dado que la molécula H_2O_2 , que al interactuar con dichos iones deben dar lugar a compuestos complejos o de coordinación¹³. La configuración electrónica abreviada de estos iones, con sus respectivos orbitales “d” incompletos, se encuentra representada a continuación mediante diagramas de cajas:



Por ejemplo, el cinc no se utilizará pues no se considera un elemento de transición al no tener su ion orbitales “d” vacíos y/o electrones desapareados.

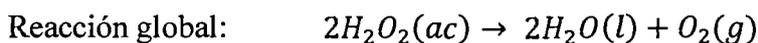
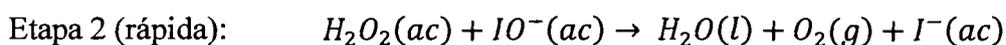
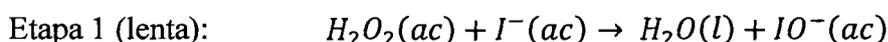
¹³ De los Santos J., Hernández J.L. y Fernández R. *Catálisis I.* (España)
<http://www.heurema.com/QG3.htm>

4. Mecanismos de actuación probables

Los mecanismos de actuación son complejos y diferentes para cada catalizador:

- *Catalizador yoduro de potasio*

El más conocido es el de Augustus Harcourt y William Esson¹⁴, que propusieron el siguiente mecanismo:



El catalizador se consume en la 1ª etapa y se regenera en la 2ª (véase figura 2); por lo tanto no aparece en la ecuación de la reacción global. La velocidad de la reacción viene impuesto por la etapa más lenta, la de mayor energía de activación, en este caso la primera.

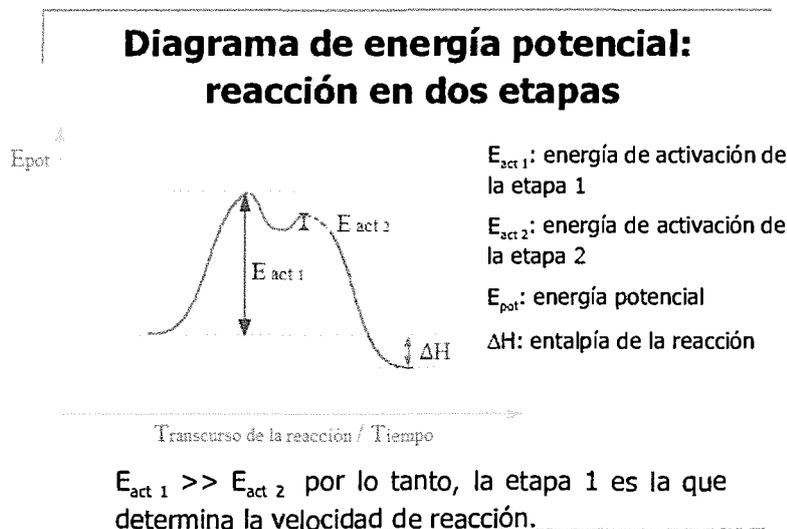
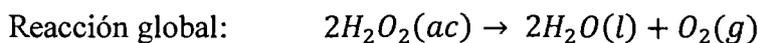
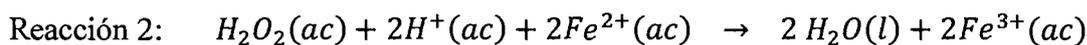
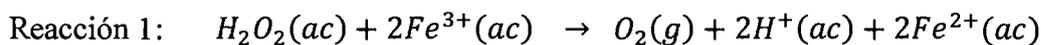


Figura 2. Diagrama entálpico para una reacción en dos etapas

- *Catalizador cloruro de hierro (III) hexahidratado*

El mecanismo de la descomposición del agua oxigenada en este caso, a pesar de ser uno de los más estudiados, no se conoce aún en su totalidad. El más probable es:

¹⁴ Stanisavljev, D. R., y M. C. Milenković. (2011). *The kinetics of iodide oxidation by hydrogen peroxide in acid solution*. (Rusia)



Como se puede observar, el Fe^{3+} , consumido en una reacción, se forma en la otra, por lo que no afecta a la reacción global y actúa como catalizador en la descomposición del H_2O_2 . Esto mismo se cree que podría ocurrir con el ion cobre (II), en el cuál el ion intermedio de la reacción sería el ion cobre (I). En el caso del ion cobalto (III) su intermedio sería el ion cobalto (II). En el caso del ion Fe^{2+} , se ve sometido exactamente al mismo proceso, salvo que se invierten el orden de las dos reacciones anteriormente mostradas, de forma que continúa sin afectar a la reacción global.

○ *Catalizador dióxido de manganeso*

En la figura aparece de forma esquematizada el mecanismo teórico más probable de la descomposición del agua oxigenada catalizada por dióxido de manganeso como catalizador heterogéneo pues dicha sustancia es insoluble en agua.

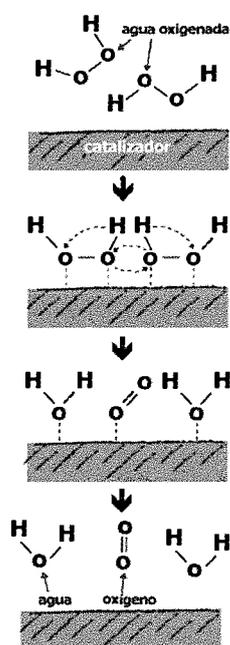


Figura 3. Mecanismo de actuación del MnO_2

La unión de moléculas de agua oxigenada sobre la superficie de un catalizador sólido facilita, por adherencia, la ruptura de los enlaces ($H-O-O-H$) y formación de uniones químicas¹⁵.

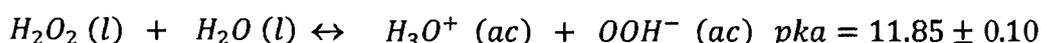
¹⁵ Colección "Educ.ar". *Ensayo del efecto catalizador del dióxido de manganeso*. Ministerio de Educación (Argentina). <http://coleccion.educ.ar/coleccion/CD21/ce/materialesymetodos.html>

5. Identificación de variables

- Variable dependiente: **Volumen de O₂ (mL)** obtenido a partir de la descomposición del H₂O₂ y recogido mediante el método de la probeta invertida, que será el método que se va a utilizar en esta investigación.
- Variable independiente: **Tiempo (s)** transcurrido en completarse la reacción. Se tomarán las medidas del volumen de O₂ cada 30 segundos. Se parará el cronometro cuando el volumen de O₂ desprendido sea cero.

- Variables de control y método de control:

- El peróxido de hidrógeno actúa en agua como un ácido débil. Su reacción es:



Como su pK_a es muy pequeño se puede despreciar su disociación. Sin embargo, el *pH de la solución* debe mantenerse constante para que la concentración de iones [H₃O⁺] permanezca constante. Esto es difícil de controlar pues en la semirreacción de producción del oxígeno se produce hidrógeno; de ahí, que se haya pensado en el uso de sales procedentes de bases y ácidos fuertes, completamente disociadas, como catalizadores para que éstos no sufran procesos de hidrólisis. Se medirá el pH al inicio y final de cada investigación.

- La *temperatura de los reactivos* debe de ser la misma para todas las pruebas. Si existiera un aumento de la temperatura aumentaría rápidamente la velocidad de descomposición. El peróxido de hidrogeno es un potente agente oxidante relativamente estable, que al calentarlo o por exposición prolongada a luz se descompone con facilidad; razón por la cual, durante toda la investigación se mantendrá en envases opacos y a temperatura baja. Además, se sabe que la reacción de descomposición es *exotérmica*. Si fuera posible en el montaje se utilizará un baño termostático.
- La *molaridad* (0.5 M) y el *volumen* vertido (5 ml) de los *catalizadores* (homogéneos) o el número de *gramos* correspondiente a esa molaridad y volumen (heterogéneos) será el mismo en todas las medidas, así como el *volumen de agua oxigenada* para cada experiencia (20 ml).
- Se utilizará siempre *peróxido de hidrógeno comercial marca "Iberpos" del 3%* y del mismo fabricante. Es barato y al estar diluido su toxicidad es baja.

6. Hipótesis

Al aumentar el número de electrones desapareados y/o los orbitales “d” vacíos del catalizador, aumenta la velocidad de descomposición del H_2O_2 .

7. Método experimental

7.1. Reactivos

- H_2O_2 comercial marca “Iberpos” al 3% (10 volúmenes)
- Catalizadores que contienen iones de metales de transición (0.5M):
 - Cu^{2+} : $CuSO_4 \cdot 5H_2O$
 - Co^{2+} : $Cl_2Co \cdot 6H_2O$
 - Fe^{2+} : $FeSO_4 \cdot 7H_2O$
 - Fe^{3+} : $FeCl_3 \cdot 6H_2O$
 - Mn^{4+} : MnO_2
- Catalizador con ion halógeno I^- : KI (también 0.5 M).

7.2. Materiales

- Mortero
- Vaso de precipitados de 100 ml
- Varilla
- Matraz aforado de 100 ml
- Embudo
- Base
- Varilla de soporte
- Nuez doble
- Pinzas de bureta
- Cristalizador de 500 ml
- Probeta de 250 cm^3 ($\pm 1\text{ ml}$)
- Matraz Erlenmeyer de 250 cm^3
- Tubo de goma de 30 cm.
- Tapón con un agujero.
- Pipeta ($\pm 0.1\text{ ml}$)
- Termómetro ($\pm 0.1\text{ }^\circ\text{C}$)
- pHmetro (± 0.1)

- Sensor de oxígeno Vernier. Rango de medida 0-27 % en volumen de O_2 (± 0.1 %)

7.3. Procedimiento

1. Preparar las disoluciones 0.5 M de cada uno de los catalizadores, para ello:
 - a) Pesar la masa equivalente a 0.05 moles (utilizar el mortero si es necesario para pulverizar finamente la sal)
 - b) Disolver esa cantidad con un poco de agua destilada en un vaso de precipitados.
 - c) Llenar el matraz aforado con esta disolución y añadir agua destilada mediante un embudo hasta enrasar a 100 ml.
2. Rellenar de agua corriente el cristizador y la probeta.
3. Realizar el montaje experimental de la figura 3 invirtiendo la probeta llena de agua.

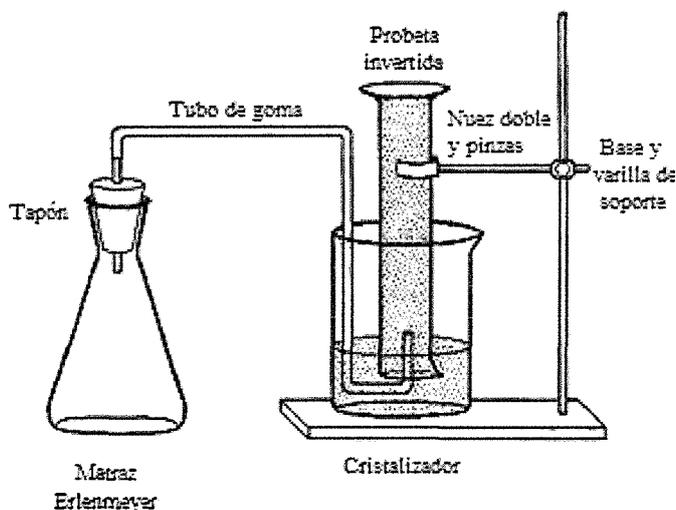


Figura 3. Montaje experimental del método I¹⁶

4. Pipetear 20 ml de H_2O_2 en el matraz Erlenmeyer y medir su pH y temperatura.
5. Pipetear 5 ml de catalizador en el matraz Erlenmeyer taponándolo inmediatamente después de verterlo para perder la menor cantidad de O_2 posible. Si se trata de un catalizador heterogéneo, añadir la cantidad en

¹⁶Laboratorio químico. *Práctica 2 : Reacciones Químicas*. <http://laboratorio-quimico.wikispaces.com/file/view/Dibujo2.jpg/128822515/330x288/Dibujo2.jpg>

gramos que equivaldría a los moles presentes en 5 ml de una disolución 0.5 M de ese compuesto.

6. Poner en marcha el cronómetro y anotar el volumen de O_2 desprendido cada 30 segundos.
7. Cuando el volumen de O_2 formado sea ínfimo, destapar el Erlenmeyer y medir de nuevo la temperatura y el pH de la disolución.
8. Comprobar el volumen de oxígeno obtenido mediante el sensor de oxígeno Vernier.
9. Repetir la experiencia cuatro veces más.

8. Obtención de datos

En las tablas, desde la 2 hasta 8, aparecen los datos obtenidos. Las anotaciones de pH, volumen y temperatura en negrilla significan:

- **V de O_2** : Valores del volumen de O_2 recogidos en la probeta. Cada una de las cinco columnas representan las cinco repeticiones que se realizaron para cada catalizador.
- **pH₀**: media (de las 5 repeticiones) del pH antes de verter el catalizador.
- **pH_f**: media (de las 5 repeticiones) del pH tras finalizar la emisión de O_2 .
- **T_{0-min}**: menor temperatura (de las 5 repeticiones) antes de verter el catalizador.
- **T_{f-máx}**: mayor temperatura (de las 5 repeticiones) tras finalizar la emisión de O_2 .

Tabla 2. $FeCl_3 \cdot 6H_2O$ (Fe^{3+}) Homogéneo

pH₀ (± 0.01)	3.06		T_{0-min} (±0.1 °C)	17.3	
pH_f(± 0.01)	1.96		T_{f-máx} (±0.1 °C)	22.7	
Tiempo (± 1 s)	V de O_2 (± 2 ml)				
0 ¹⁷	26	88	28	84	34
30	28	92	28	90	38
60	28	96	42	90	42
90	32	100	44	96	50
120	36	106	44	98	52
150	42	110	46	100	56
180	48	112	50	106	60
210	50	116	54	110	66
240	56	122	60	114	70
270	62	126	62	118	74
300	68	130	70	122	78
330	76	138	74	128	82
360	82	142	78	132	88
390	86	146	82	136	94

¹⁷ Nota: Señal inicial de agua de la probeta invertida

Tabla 3. $FeCl_3 \cdot 6H_2O$ (Fe^{3+}) Heterogéneo

$pH_0 (\pm 0.01)$	3.07		$T_{0-mín} (\pm 0.1 \text{ } ^\circ\text{C})$		19.3
$pH_f (\pm 0.01)$	1.00		$T_{f-máx} (\pm 0.1 \text{ } ^\circ\text{C})$		23.3
Tiempo (± 1 s)	V de O_2 (± 2 ml)				
0 ¹⁸	26	26	28	20	24
30	38	62	40	34	30
60	56	88	52	60	48
90	76	110	72	70	52
120	100	132	100	90	80
150	120	150	118	96	92
180	134	164	130	120	110
210	140	178	142	134	115
240	162	190	156	146	128
270	170	202	166	156	138
300	180	206	174	160	146
330	188	212	182	172	156
360	192	216	188	174	160
390	198	220	190	180	168
420	200	222	196	184	172
450	204	228	200	189	176
480	208	230	202	192	180
510	210	232	206	194	180
540	212	234	210	198	184
570	212	236	210	198	186
600	212	236	212	200	190
630	214	238	212	200	190
660	216	238	212	200	192
690	216	240	214	204	194
720	218	240	216	208	196

¹⁸ Nota: Ídem

Tabla 4. KI (I⁻) Homogéneo

pH₀ (± 0.01)	3.16	T_{0-mín} (±0.1 °C)			16.8
pH_f (± 0.01)	7.55	T_{f-máx} (±0.1 °C)			25.0
Tiempo (± 1 s)	V de O₂ (± 2 ml)				
0 ¹⁹	92	34	24	24	40
30	96	40	32	28	46
60	104	44	40	38	54
90	110	54	48	46	60
120	116	60	58	56	68
150	124	66	68	60	74
180	130	74	76	70	80
210	136	80	82	80	88
240	142	86	90	90	92
270	154	90	98	98	98
300	160	96	108	104	104
330	164	100	114	114	110
360	172	104	124	122	116
390	180	110	132	130	122

¹⁹ Nota: Ídem

Tabla 5. KI (I⁻) Heterogéneo

pH₀ (± 0.01)	2.81	T_{0-mín} (±0.1 °C)				18.1
pH_f (± 0.01)	7.24	T_{f-máx} (±0.1 °C)				24.4
Tiempo (± 1 s)	V de O₂ (± 2 ml)					
0 ²⁰	20	32	22	20	20	
30	30	46	34	26	30	
60	44	54	42	34	42	
90	58	66	50	40	52	
120	70	76	60	50	62	
150	80	84	76	58	70	
180	90	94	84	64	82	
210	100	104	90	70	90	
240	110	112	100	76	100	
270	118	120	110	82	108	
300	124	126	116	90	114	
330	130	130	124	94	122	
360	140	140	128	100	130	
390	146	146	132	108	134	
420	152	150	140	112	140	
450	156	158	144	120	146	
480	162	160	150	122	150	
510	166	168	151	128	154	
540	170	170	158	132	160	
570	176	174	162	138	164	
600	180	178	168	142	168	
630	184	186	170	146	172	
660	186	190	174	150	176	
690	190	190	178	154	178	
720	192	192	180	158	180	

²⁰ Nota: ídem

Tabla 6. MnO_2 (Mn^{4+}) Heterogéneo

$pH_0 (\pm 0.01)$	3.11		$T_{0-mín} (\pm 0.1 \text{ } ^\circ\text{C})$		17.4
$pH_f (\pm 0.01)$	7.00		$T_{f-máx} (\pm 0.1 \text{ } ^\circ\text{C})$		20.0
Tiempo (± 1 s)	V de O_2 (± 2 ml)				
0 ²¹	24	30	20	22	26
30	58	50	54	50	50
60	70	62	70	70	68
90	75	74	84	82	80
120	90	84	96	90	90
150	96	92	104	98	100
180	108	100	110	108	108
210	114	106	118	114	114
240	120	110	122	120	120
270	128	116	128	126	128
300	132	120	134	130	130
330	140	122	138	136	136
360	142	130	142	138	142
390	148	132	146	142	146
420	150	136	150	146	150
450	154	138	152	152	152
480	158	140	154	154	156
510	160	146	158	156	160
540	162	150	162	160	162
570	166	150	162	162	166
600	170	152	168	166	168
630	172	154	170	168	170
660	172	156	172	170	172
690	174	160	174	172	176
720	176	162	174	174	180

²¹Nota: ídem

Tabla 7. $FeSO_4 \cdot 7H_2O$ (Fe^{2+}) Homogéneo

pH_0 (± 0.01)	3.08		T_{0-min} (± 0.1 °C)		19.2
pH_f (± 0.01)	2.56		T_{f-max} (± 0.1 °C)		20.3
Tiempo (± 1 s)	V de O_2 (± 2 ml)				
0 ²²	22	28	22	22	24
30	38	40	46	38	50
60	52	54	58	52	64
90	66	64	72	66	80
120	78	78	84	78	90
150	92	90	100	88	104
180	100	100	108	96	110
210	110	110	116	102	118
240	120	118	124	112	126
270	124	126	132	120	132
300	132	134	138	124	136
330	138	140	144	130	144
360	144	146	148	134	150
390	148	150	150	140	152
420	152	152	158	142	158
450	156	158	160	146	160
480	158	162	162	150	162
510	160	164	164	152	164
540	164	166	168	154	168
570	166	170	170	160	170
600	168	170	172	160	172
630	170	172	174	162	172
660	172	176	176	164	172
690	172	176	178	166	174
720	174	176	178	168	176

²² Nota: ídem

Tabla 8. $FeSO_4 \cdot 7H_2O$ (Fe^{2+}) Heterogéneo

$pH_0 (\pm 0.01)$	3.17		$T_{0-min} (\pm 0.1 \text{ } ^\circ\text{C})$		18.2
$pH_f (\pm 0.01)$	2.41		$T_{f-max} (\pm 0.1 \text{ } ^\circ\text{C})$		20.3
Tiempo (± 1 s)	V de O_2 (± 2 ml)				
0 ²³	24	20	20	20	26
30	58	64	50	52	50
60	76	90	74	74	74
90	96	100	90	90	92
120	100	110	104	102	108
150	114	124	110	114	122
180	124	132	126	124	130
210	130	140	130	130	140
240	138	150	140	140	148
270	144	156	144	144	154
300	150	160	150	150	162
330	154	162	156	154	164
360	160	166	160	160	168
390	164	170	164	162	172
420	168	174	168	168	176
450	170	176	170	170	180
480	172	180	172	170	182
510	174	182	174	176	184
540	176	182	176	178	186
570	178	184	180	178	190
600	180	186	180	180	190
630	182	188	182	182	190
660	182	190	182	184	192
690	186	190	184	184	192
720	188	190	186	186	192

²³ Nota: ídem

9. Procesamiento de Datos

1. Calcular la diferencia de O_2 desprendido. (Tomando como ejemplo al Fe^{3+} Heterogéneo)

Tabla 9. Volumen de oxígeno obtenido Fe^{3+} Heterogéneo

Tiempo (± 1 s)	V de O_2 (± 4 ml) ²⁴				
	0	0	0	0	0
30	12	36	12	14	6
60	30	62	24	40	24
90	50	84	44	50	28
120	74	106	72	70	56
150	94	124	90	76	68
180	108	138	102	100	86
210	114	152	114	114	91
240	136	164	128	126	104
270	144	176	138	136	114
300	154	180	146	140	122
330	162	186	154	152	132
360	166	190	160	154	136
390	172	194	162	160	144
420	174	196	168	164	148
450	178	202	172	169	152
480	182	204	174	172	156
510	184	206	178	174	156
540	186	208	182	178	160
570	186	210	182	178	162
600	186	210	184	180	166
630	188	212	184	180	166
660	190	212	184	180	168
690	190	214	186	184	170
720	192	214	188	188	172

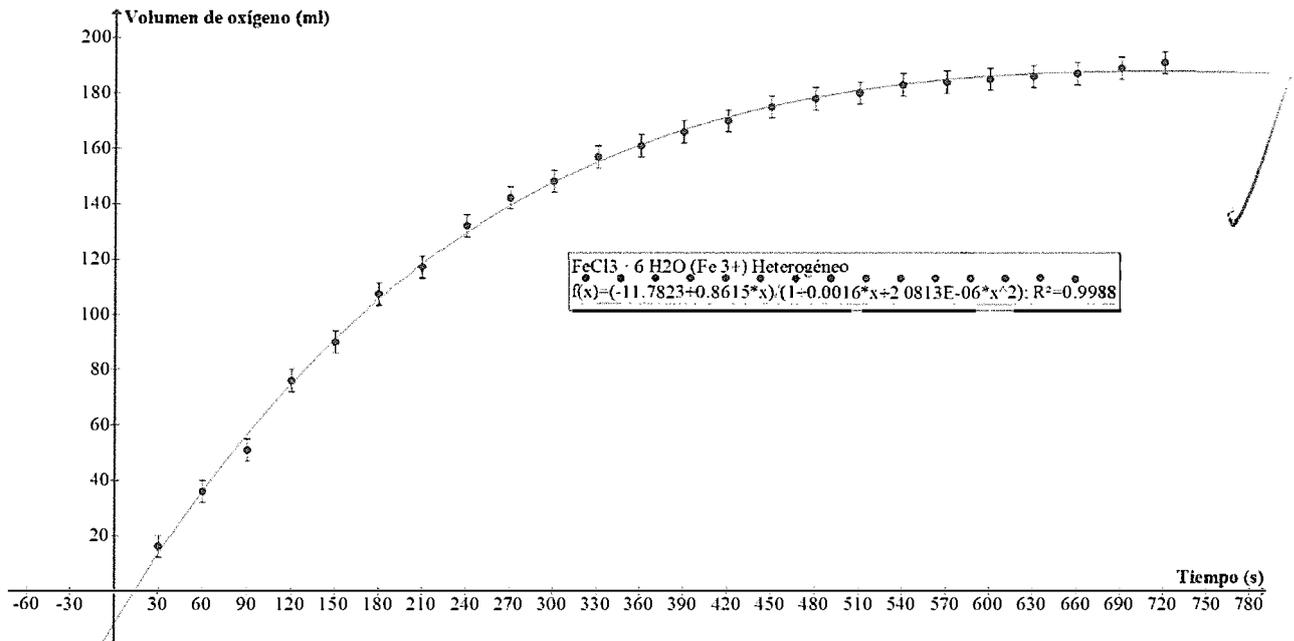
²⁴ Nota: El error absoluto pasa de 2 a 4 ml ya que, al calcular la diferencia del volumen de O_2 entre dos intervalos distintos de tiempo, se suman los errores absolutos de las dos medidas restadas.

2. Calcular la media del incremento de O_2 desprendido.

Tabla 10. Volumen oxígeno medio Fe^{3+} Heterogéneo

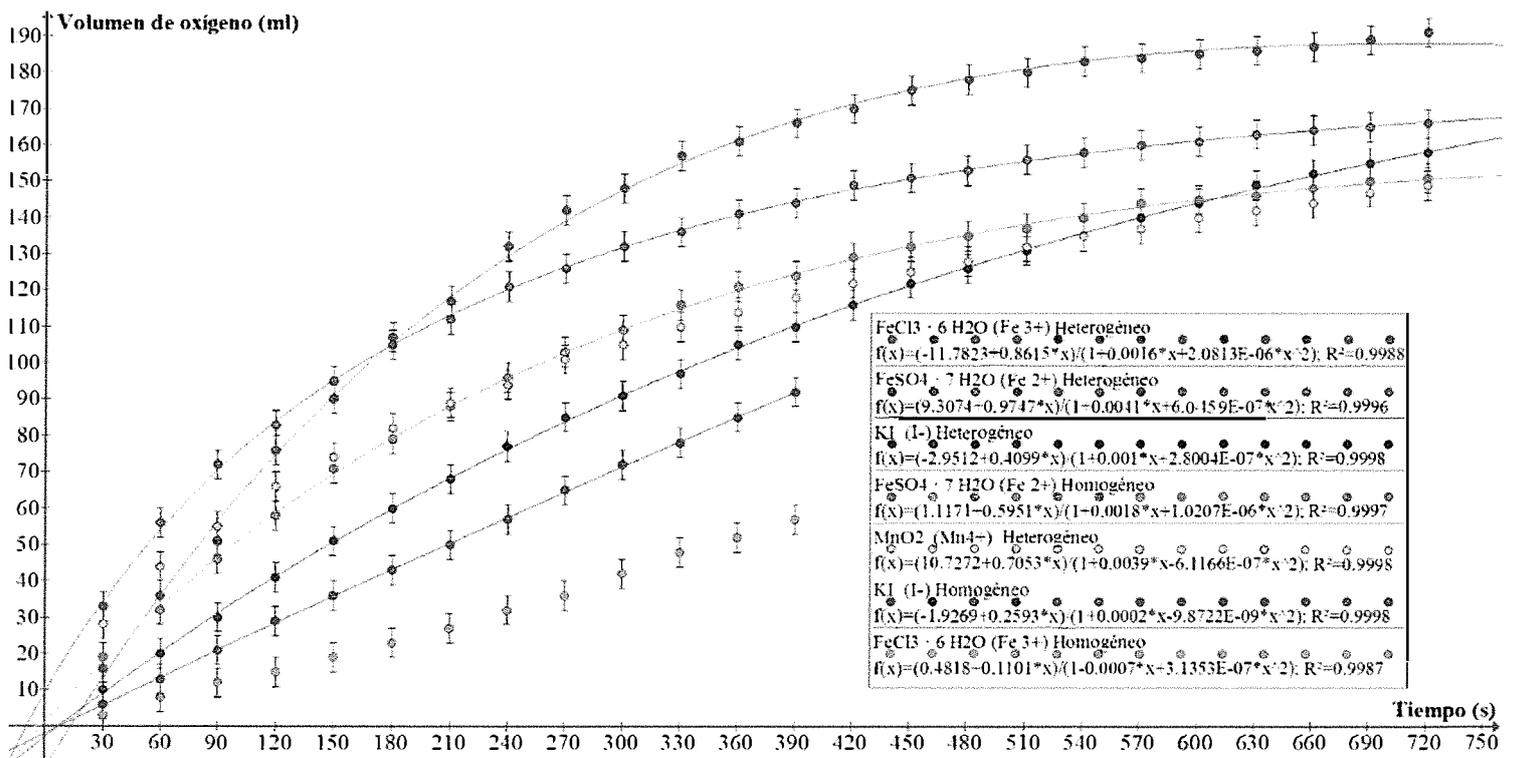
Tiempo (± 1 s)	V de O_2 (± 4 ml)
0	0
30	16
60	36
90	51
120	76
150	90
180	107
210	117
240	132
270	142
300	148
330	157
360	161
390	166
420	170
450	175
480	178
510	180
540	183
570	184
600	185
630	186
660	187
690	189
720	191

3. Representar el promedio del volumen de O_2 formado frente al tiempo.

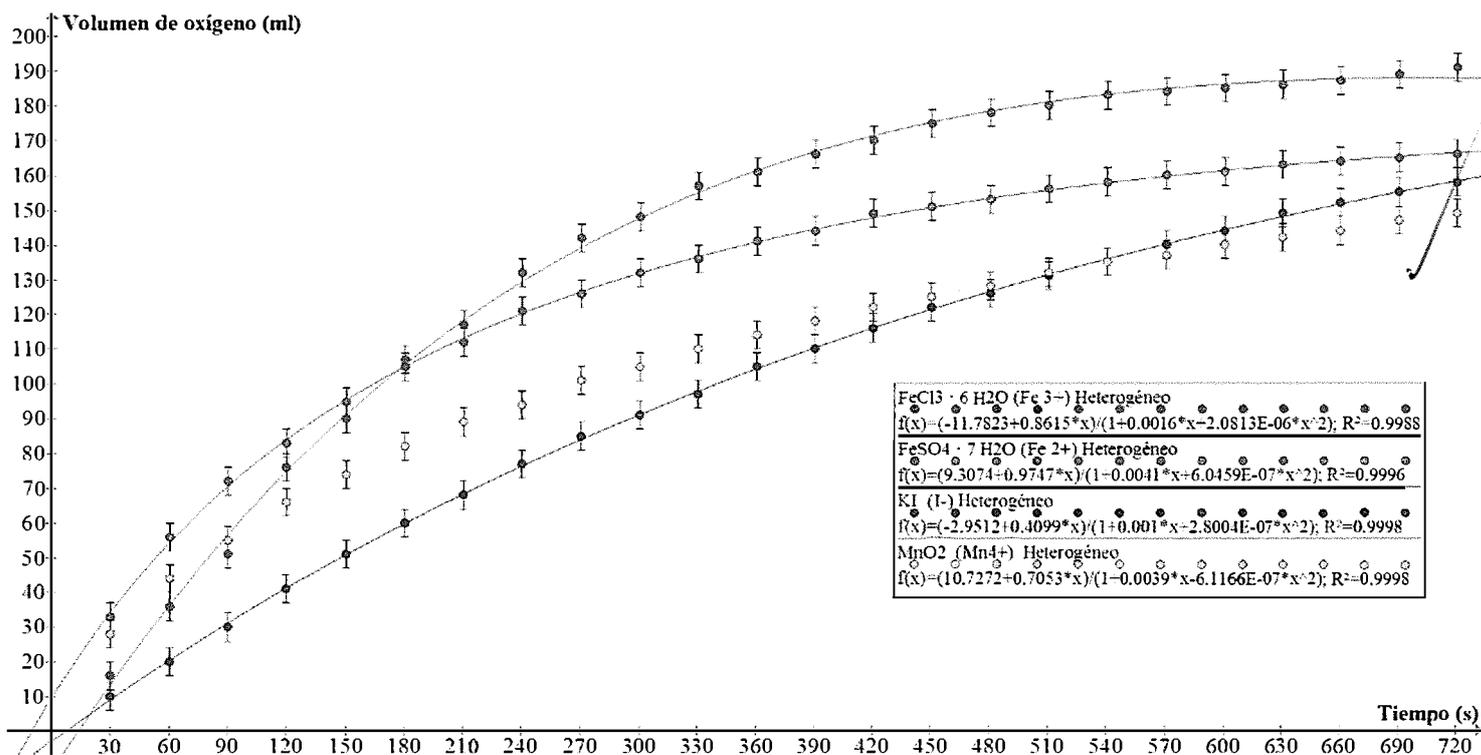


Gráfica 1. Efecto del $FeCl_3 \cdot 6H_2O$ en el volumen de O_2 desprendido

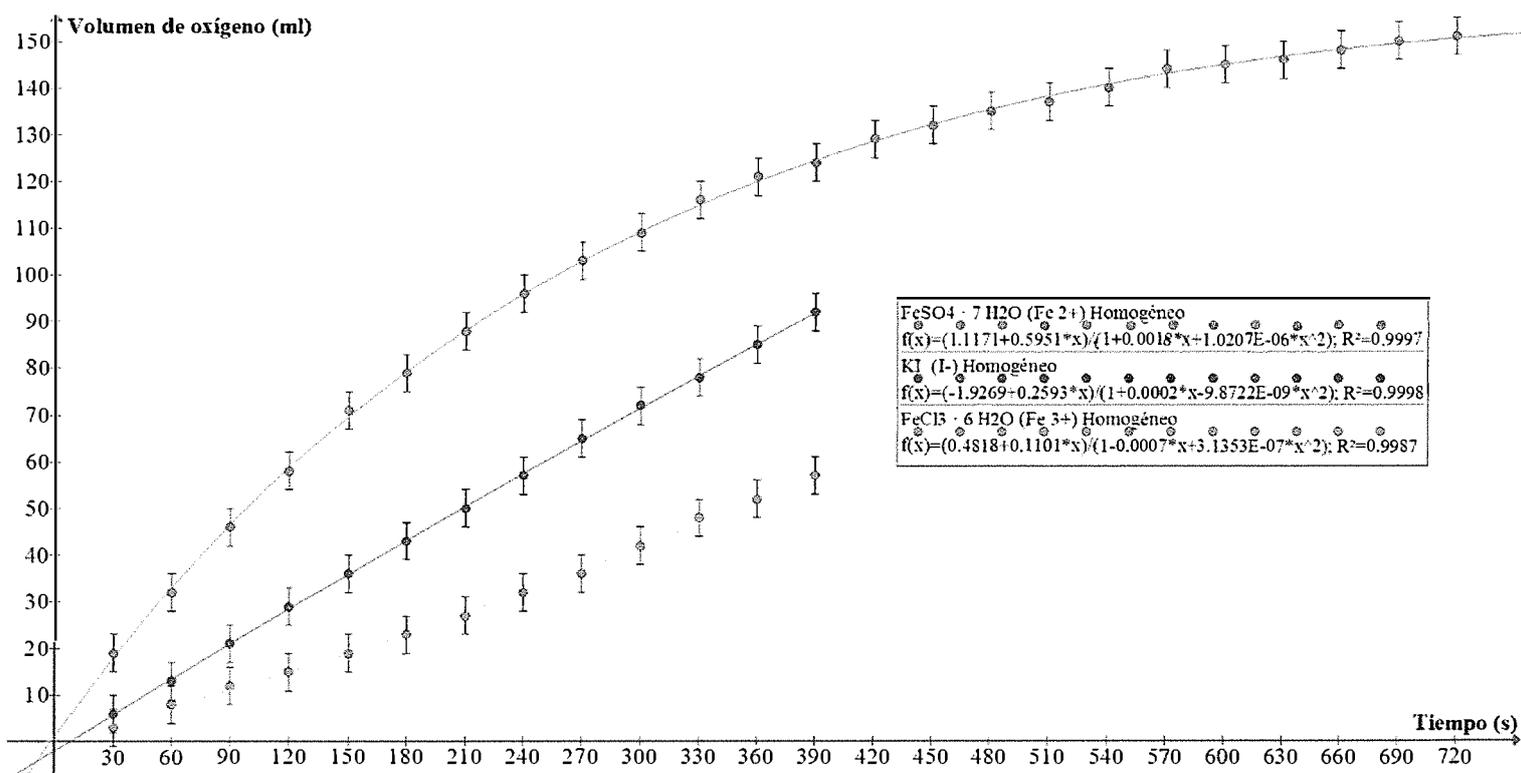
4. Realizar el mismo proceso con el resto de catalizadores y comparar las gráficas obtenidas.



Gráfica 2. Comparación del efecto de los diferentes catalizadores en la catálisis del H_2O_2



Gráfica 3. Comparación del efecto de los catalizadores heterogéneos en la catálisis del H_2O_2



Gráfica 4. Comparación del efecto de los catalizadores homogéneos en la catálisis del H_2O_2

5. Seguidamente, vamos a estimar el valor del periodo de semireacción²⁵ del H_2O_2 .

5.1. Calcular el número de moles de O_2 desprendido y de H_2O_2 consumido. Al encontrarse el oxígeno en estado gaseoso, obtendremos este valor utilizando la ecuación de los gases ideales:

$$N = \frac{PV}{RT}$$

Se utilizarán condiciones normales, ya que la experiencia se realizó a lo largo de dos meses, de forma que los valores de presión y temperatura no fueron constantes.

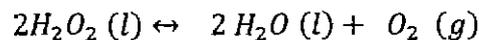
- **P:** La presión absoluta del gas es igual a la presión atmosférica menos la presión de vapor del agua.

$$P = P_{atm}^{26} - P_{V_{H_2O}}^{27} = 760 - 4.58 = 755.42 \text{ mm Hg} = 0.994 \text{ atm}$$

- **R²⁸:** $0.082 \text{ atm} \cdot \text{l} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
- **T:** En condiciones normales la temperatura es igual a 273 K

5.1.1. Continuando el ejemplo del Fe^{3+} heterogéneo:

- Tomando como ejemplo la primera medida:



$$N_{O_2} = \frac{PV}{RT} = \frac{0.994 \cdot 0.016}{0.082 \cdot 273} = 0.71 \cdot 10^{-3} \text{ moles de } O_2$$

$$N_{H_2O_2} = 0.71 \cdot 10^{-3} \text{ moles de } O_2 \cdot \frac{2 \text{ moles de } H_2O_2}{1 \text{ mol de } O_2} = 1.42 \text{ moles de } H_2O_2$$

²⁵ **Nota:** El periodo de semireacción o vida media del H_2O_2 es el tiempo que tarda el peróxido de hidrógeno en reducir su concentración a la mitad.

²⁶ Fernández M.R. y Fidalgo J. A. (1995). *Química General*. Editorial Everest, S.A. León (España)

²⁷ Vaxa Software. *Presión de vapor de agua líquida y hielo a varias temperaturas*
http://www.vaxasoft.com/doc_edu/qui/pvh2o.pdf

²⁸ Fernández M.R. y Fidalgo J. A. (1995). *Química General*. Editorial Everest, S.A. León (España)

Tabla 11. Moles de O_2 producidos y Moles de H_2O_2 reaccionantes

Tiempo (± 1 s)	V de O_2 (± 4 ml)	Moles de $O_2 \cdot 10^{-3}$ ($\pm 0.18 \cdot 10^{-3}$ moles)	Moles de $H_2O_2 \cdot 10^{-3}$ ($\pm 0.36 \cdot 10^{-3}$ moles)
30	16	0.71	1.42
60	36	1.60	3.20
90	51	2.26	4.53
120	76	3.37	6.75
150	90	4.00	7.99
180	107	4.75	9.50
210	117	5.19	10.39
240	132	5.86	11.72
270	142	6.31	12.61
300	148	6.57	13.14
330	157	6.97	13.94
360	161	7.15	14.30
390	166	7.37	14.74
420	170	7.55	15.10
450	175	7.77	15.54
480	178	7.90	15.81
510	180	7.99	15.98
540	183	8.13	16.25
570	184	8.17	16.34
600	185	8.21	16.43
630	186	8.26	16.52
660	187	8.30	16.61
690	189	8.39	16.78
720	191	8.48	16.96

5.2. Calcular la concentración inicial de peróxido de hidrógeno.

Se sabe que el agua oxigenada comercial utilizada es de un 3% (10 vol). Agua oxigenada 10 volúmenes significa que 1 litro de la solución produce 10 litros de O_2 en C.N. En nuestro caso, al restarle la presión de vapor del agua, se obtienen 9.94 L de O_2 . En estas mismas condiciones un mol de gas ideal ocupan 22.53 L, por lo que considerando al oxígeno un gas ideal, la cantidad de moles de oxígeno es:

$$n_{O_2} = \frac{9.94L}{22.53 L \cdot mol^{-1}} = 0.441 \text{ moles de } O_2$$

Por estequiometria calculamos los moles iniciales del peróxido:

$$0.041 \text{ moles } O_2 \cdot \frac{2 \text{ moles } H_2O_2}{1 \text{ mol } O_2} = 0.882 \text{ moles de } H_2O_2$$

Este dato se encuentra referido a 1 L de disolución. Por lo que la concentración inicial de H_2O_2 es **0.882 M**

5.3. Calcular la concentración de agua oxigenada sobrante.

$$[H_2O_2]_{\text{sobrante}} = [H_2O_2]_{\text{inicial}} - [H_2O_2]_{\text{consumido}} = 0.882 - [H_2O_2]_{\text{consumido}}$$

- Tomando como ejemplo la primera medida:

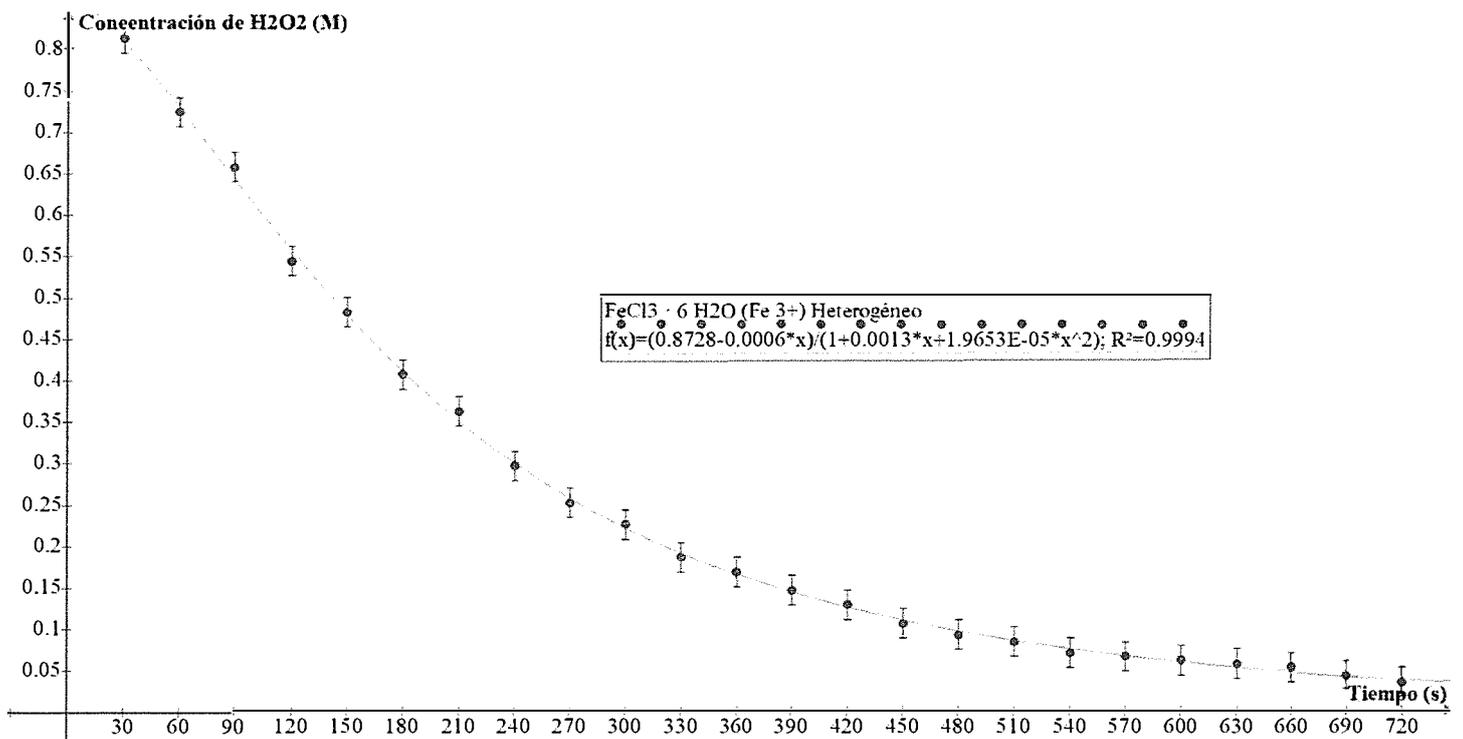
$$[H_2O_2]_{\text{sobrante}} = 0.882 M - \frac{1.42 \text{ moles de } H_2O_2}{0.02 L \text{ de } H_2O_2 \text{ pipeteados}} = 0.811 M$$

Tabla 12. Concentración H_2O_2 sin reaccionar (Fe^{3+} Heterogéneo)

Tiempo (± 1 s)	Concentración de H_2O_2 (± 0.018 M)
30	0.811
60	0.723
90	0.656
120	0.545
150	0.483
180	0.407
210	0.363
240	0.296
270	0.252
300	0.225
330	0.185
360	0.168
390	0.145
420	0.128
450	0.105
480	0.092
510	0.083

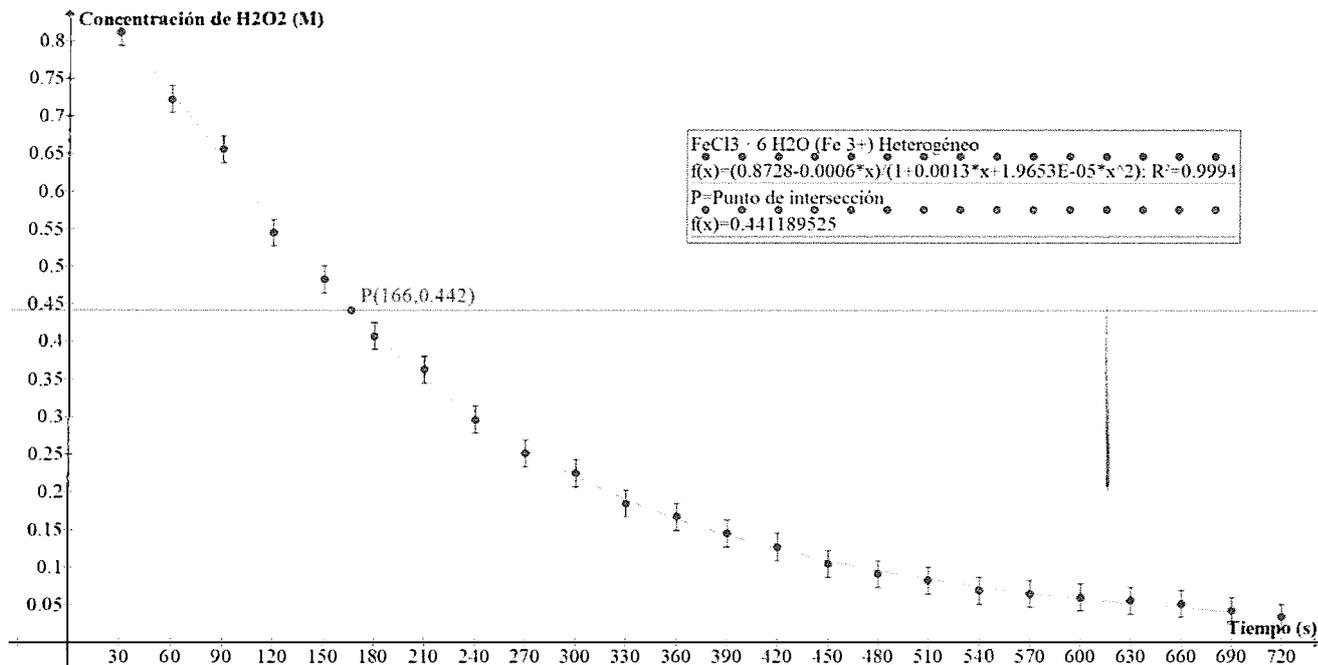
540	0.070
600	0.061
630	0.057
660	0.052
690	0.043
720	0.034

5.4. Representar la concentración de H_2O_2 sobrante frente al tiempo. Véanse las gráficas del resto de catalizadores en el *Anexo B*.



Gráfica 5. Efecto del $FeCl_3 \cdot 6H_2O$ heterogéneo en la concentración del H_2O_2

5.5. Estimar el tiempo necesario para que la concentración inicial se reduzca a la mitad. Para ello se trazará la recta horizontal $f(x) = 0.082 \cdot 0.5 = 0.441$ y se hallará la intersección entre ambas funciones.



Gráfica 6. Cálculo del periodo de semidesintegración del H_2O_2 bajo efecto del $FeCl_3 \cdot 6H_2O$ heterogéneo

Por lo tanto, la **vida media** de la reacción de descomposición del agua oxigenada catalizada mediante el $FeCl_3 \cdot 6H_2O$ heterogéneo es de **166 s**.

5.6. Realizar el mismo proceso con el resto de catalizadores y comparar los periodos obtenidos.

Tabla 12. Vida media de los diferentes catalizadores en la reacción de descomposición del H_2O_2

Catalizador	Vida media o semivida (s)
$FeCl_3 \cdot 6H_2O (Fe^{3+})$ Heterogéneo	166
$FeSO_4 \cdot 7H_2O (Fe^{2+})$ Heterogéneo	167
$FeSO_4 \cdot 7H_2O (Fe^{2+})$ Homogéneo	251
$MnO_2 (Mn^{4+})$ Heterogéneo	263
$KI (I^-)$ Heterogéneo	337
$KI (I^-)$ Homogéneo	424
$FeCl_3 \cdot 6H_2O (Fe^{3+})$ Homogéneo	588

10. Conclusiones

10.1. Discusión de los resultados y limitaciones

Respecto a la precisión de los resultados, el método utilizado no nos proporciona un error porcentual para los valores finales obtenidos. A partir de los datos brutos sí podemos afirmar que, en las mediciones iniciales, el error relativo es alto, (en torno a un 25%) debido a que el volumen medido es pequeño en comparación con la incertidumbre. Sin embargo, en las medidas finales, el volumen anotado es mucho mayor, lo que provoca que este error sea bastante menor (alrededor del 2%). La alta imprecisión de los valores iniciales se debe a la utilización de una probeta de 250 ml, con un error absoluto de ± 2 ml. Para tratar de reducirlo se utilizó una bureta, cuya incertidumbre es de ± 0.1 ml, sin embargo, dado que 50 ml era el volumen máximo recogido por este instrumento²⁹, se descartó su utilización.

El resto de errores aleatorios que han podido aumentar la imprecisión de los resultados están relacionados en su mayoría con lo rudimentario del método:

- Estrangulamiento de la goma. El tubo se curva al entrar en la probeta, lo que provoca que a veces el oxígeno tarde más tiempo en llegar su final. Para tratar de reducirlo se inclinó el matraz Erlenmeyer, de forma que el ángulo que forma el tubo se viese disminuido.
- Para acelerar el proceso de descomposición se agitó el Erlenmeyer manualmente ya que el uso de un agitador magnético provocaba un estrangulamiento que no permitía el paso de aire por la goma. Fue muy complicado mantener constante el ritmo de agitación.
- Error de paralaje de la probeta y pipeta.

Todos estos errores tienen en común la característica de que se solucionan repitiendo medidas, por lo que tal y como se muestra en las tablas de datos brutos, se realizaron un elevado número de mediciones con cada catalizador.

También podemos hacer alusión a las gráficas para evaluar de nuevo la precisión de los resultados. Como podemos observar en la *Gráfica 2*, todos los catalizadores tienen un R^2 muy alto, de hecho, ninguno es menor que 0.998, por lo que a pesar de no conocer el error relativo de los resultados finales, sí podemos afirmar que los resultados son **bastante precisos**.

No podemos analizar la exactitud de los valores obtenidos porque no conocemos el valor teórico³⁰.

²⁹ **Nota:** El volumen máximo recogido por la bureta (50 ml) es mucho menor que el volumen máximo de O_2 desprendido.

³⁰ **Nota:** No conocemos el valor teórico porque el periodo de semivida depende de la naturaleza de la reacción y de las condiciones en las que se lleva a cabo, de forma que es muy complicado encontrar unos resultados hallados en una situación similar.

Aun así, encontramos una serie de errores sistemáticos que podrían haber aumentado la inexactitud del método:

- No se mide el tiempo cuando se desprende el oxígeno, sino cuando llega al final de la probeta. De forma que según el estrangulamiento de la goma o la longitud de la misma el tiempo anotado puede variar.
- Se ha tomado al O_2 como un gas ideal, cuando es real.
- Se utilizaron C.N.P.T. en el cálculo del periodo de semivida, cuando este no era el estado del laboratorio en ningún momento. Sin embargo, se optó por esta medida para aunar unas condiciones que habían variado bastante a lo largo de los dos meses y medio durante los cuales se realizaron las mediciones.
- No se controló el pH, como se puede observar en datos obtenidos (*Tablas 1-8*). Esto se debe a que el método de la probeta invertida no permite colocar el sensor de pH. Solo se midió al inicio y al final de cada investigación.
- No se utilizó el baño termostático, dado que tanto la temperatura ambiente como la de los reactivos se situó en torno a los 20 °C, como se puede apreciar en los datos brutos.
- No se pudo utilizar el sensor de oxígeno para el estudio cuantitativo porque su rango 0-27% no permitía medir más cantidades.
- No se utilizó el catalizador MnO_2 homogéneo porque no es soluble en agua.
- De dos de los catalizadores homogéneos sólo se tomaron medidas hasta los 6 minutos, ya que debido al estrangulamiento de la goma no se obtuvo más volumen y se pensó que la reacción había terminado.

10.2. Evaluación

La investigación muestra que, en efecto, "la catálisis del agua oxigenada es un procedimiento químico eficaz para la obtención de oxígeno" y, por tanto, se puede utilizar para depurar las aguas residuales ricas en materia orgánica.

El hecho de que los iones de Fe^{2+} Fe^{3+} tengan 4 y 5 electrones desapareados (véase sección 4) en los orbitales "d" y/o, orbitales "d" vacío, como se observa por sus configuraciones electrónicas, ha corroborado la hipótesis inicial (véase sección 7), pues al tener la posibilidad de unirse con otras sustancias se ve favorecido el proceso de descomposición del H_2O_2 .

También, el MnO_2 es mejor que el KI , pero su toxicidad es más alta. De los iones de Co^{2+} y Cu^{2+} no se muestran datos brutos porque no desprendían oxígeno. Esto se debe a que son malos catalizadores de la reacción, probablemente porque no tienen orbitales "d" vacíos, dado que no son ácidos de Lewis, o tienen muy pocos electrones desapareados.

Por el valor de la vida media del Fe^{3+} homogéneo (véase tabla 12) podríamos pensar que la hipótesis no ha sido del todo correcta. Sin embargo, en la Gráfica 12 (véase Apéndice B) observamos que para este cálculo se utilizó la prolongación de la gráfica porque no se tenía suficientes medidas. Los valores de la vida media y las gráficas, nos indican que los catalizadores heterogéneos son mejores que los

homogéneos; probablemente, se deba a que el H_2O_2 tenga un soporte material, ya que el mecanismo de **adsorción** del reactivo sobre la superficie del medio sólido favorece la rapidez de la reacción.

10.3. Propuestas de mejora

En el apartado de propuestas de mejora, sería conveniente llevar a cabo las siguientes medidas:

- Para evitar todos los problemas relacionados con el montaje experimental utilizado, se podría utilizar un sensor de oxígeno, como el descrito de la marca Vernier, pero con un rango de medida superior, de forma que permita realizar un estudio cuantitativo.
- En vez de utilizar la ecuación de los gases ideales para un gas real como el O_2 , se podrían utilizar modelos para gases reales, como el modelo de Van der Waals³¹.
- Para no usar condiciones normales, recomiendo anotar los valores de presión y temperatura ambiente cada uno de los días en los cuales se llevan a cabo mediciones, de forma que se tome la media de todas ellas.
- Para controlar el pH sería adecuado utilizar disoluciones amortiguadas o tampón, lo que provocará que el pH varíe poco.

Finalmente, propongo las siguientes medidas para ampliar la experiencia:

- Calcular la velocidad media de reacción de los diferentes catalizadores en vez del periodo de desintegración, como método para comparar los datos cualitativamente.
- Estudiar otros catalizadores de transición como, *Au*, *Pt* o *Ag*; aunque son caros, si el proceso fuera más rápido quizá fuera rentable; pero siempre teniendo en cuenta que su toxicidad sea baja.
- Aumentar algo más la concentración del peróxido de hidrógeno con el objetivo de poder estudiar los catalizadores que no desprendieron oxígeno en las condiciones empleadas.³²

³¹ Sexton A.J. (2003) *Modeling Real Gases and Liquids using a Van der Waals Equation of State*. Universidad de Louisville. (Estados Unidos). P. 2

³² **Nota:** Sin embargo, desde el punto de vista de su aplicación práctica habría que tener cuidado, porque a mayor concentración, mayor toxicidad asociada al reactivo, y se debe evitar aumentar la contaminación de las aguas con productos químicos

11. Referencias bibliográficas

11.1. Referencias bibliográficas

- Fernández M.R. y Fidalgo J. A. (1995). *Química General*. Editorial Everest, S.A. León (España)
- Harris C. (2012). *Análisis químico cuantitativo*. Editorial Reverté, S.S. Barcelona (España)
- Martín F., Cortijo M., Arrabal C., Andrés M.P. y Hermsilla D., *Tratamiento y oxidación avanzada de lixiviados de RSU*. Universidad Politécnica de Madrid. (España) P. 182
- Martínez R. (2004). *Estudios Medioambientales*. Universidad Politécnica de Cataluña. (España)
- Sexton A.J. (2003) *Modeling Real Gases and Liquids using a Van der Waals Equation of State*. Universidad de Louisville. (Estados Unidos). P.2
- Stanisavljev, D. R., y M. C. Milenković. (2011). *The kinetics of iodide oxidation by hydrogen peroxide in acid solution*. (Rusia)

11.2. Páginas web

- Rejón R. *Europa tiene abiertos 800 casos de vertidos de aguas residuales sin tratar en España*. Periódico El Diario. (España)
URL: http://www.eldiario.es/sociedad/Europa-abiertos-vertidos-residuales-Espana_0_328617844.html
(Consultado 12-12-2014)
- Ciencia en Aragón. *Catalizadores que aceleran el proceso de fabricación de nuevos fármacos*. Gobierno de Aragón (España)
URL: <http://www.aragoninvestiga.org/Catalizadores-que-aceleran-el-proceso-de-fabricacion-de-nuevos-farmacos/>
(Consultado 27-01-2015)
- González M. *Unidad Didáctica 5-2. Cinética Química*. IES Martínez Montañés. (España)
URL: https://sites.google.com/site/fisicaquimica2bachillerato/UNIDAD%20DID%20C3%81CTICA%205_2.pdf?attredirects=0&d=1
(Consultado 02-03-2015)
- Departamento de Química. *Cinética y Dinámica de las Reacciones Químicas*. Universidad de Buenos Aires. (Argentina)

- URL: http://www.q1.fcen.uba.ar/materias/qf2/cinetica_2.pdf
(Consultado 08-02-2015)
- Oliva C. *Teorías Cinéticas*. Universidad Autónoma de Madrid. (España)
URL: http://www.uam.es/docencia/revero00/docs/teorias_cineticas.pdf
(Consultado 16-09-2014)
 - De los Santos J., Hernández J.L. y Fernández R. *Catálisis I*. (España)
URL: <http://www.heurema.com/QG3.htm>
(Consultado 07-02-2015)
 - Colección "Educ.ar". *Ensayo del efecto catalizador del dióxido de manganeso*.
Ministerio de Educación (Argentina).
URL: <http://coleccion.educ.ar/coleccion/CD21/ce/materialesymetodos.html>
(Consultado 20-12-2014)
 - Laboratorio químico. *Práctica 2: Reacciones Químicas*.
URL: <http://laboratorioquimico.wikispaces.com/file/view/Dibujo2.jpg/128822515/330x288/Dibujo2.jpg>
(Consultado 18-11-2014)
 - Vaxa Software. *Presión de vapor de agua líquida y hielo a varias temperaturas*
URL: http://www.vaxasoftware.com/doc_edu/qui/pvh2o.pdf
(Consultado 03-02-2015)
 - Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo. *Fichas FISQ*. Gobierno de España. (España)
URL: <http://www.insht.es/portal/site/Insht/menuitem.a82abc159115c8090128ca10060961ca/?vgnnextoid=4458908b51593110VgnVCM100000dc0ca8c0RCRD>
(Consultado 03-03-2015)

12. Apéndices

12.1. Apéndice A: Seguridad en el laboratorio de las diferentes disoluciones (manipulación)

- $CuSO_4 \cdot 5H_2O$: No coma, no beba, no fume mientras manipule este producto. Evite el contacto con ojos piel vestidura No respire el polvo. Lávese bien después de su manipulación. Observe las prácticas generales de higiene industrial al usar este producto.³³
- $Cl_2Co \cdot 6H_2O$: Si la ventilación es inadecuada, llevar equipo de protección respiratoria. Llevar guantes, prendas, gafas y máscara de protección.³⁴
- $FeSO_4 \cdot 7H_2O$: Manipulación con implementos de seguridad, guantes de goma puño largo, lentes, ropa para productos químicos. Manipular siempre en un lugar bien ventilado lejos de corriente de aire.³⁵
- $FeCl_3 \cdot 6H_2O$: Evitar respirar el polvo/el humo/el gas/la niebla/los vapores/ el aerosol. Lavarse las manos concienzudamente tras la manipulación. Llevar guantes/prendas/gafas/máscara de protección.³⁶
- MnO_2 : No ingerir. No respire el polvo. Usar ropa protectora adecuada. En caso de ventilación insuficiente, úsese equipo de respiración.³⁷

³³ Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo. *Fichas FISQ*. Gobierno de España. (España)
<http://www.insht.es/portal/site/insht/menuitem.a82abc159115c8090128ca10060961ca/?vgnextoid=4458908b51593110VgnVCM100000dc0ca8c0RCRD>

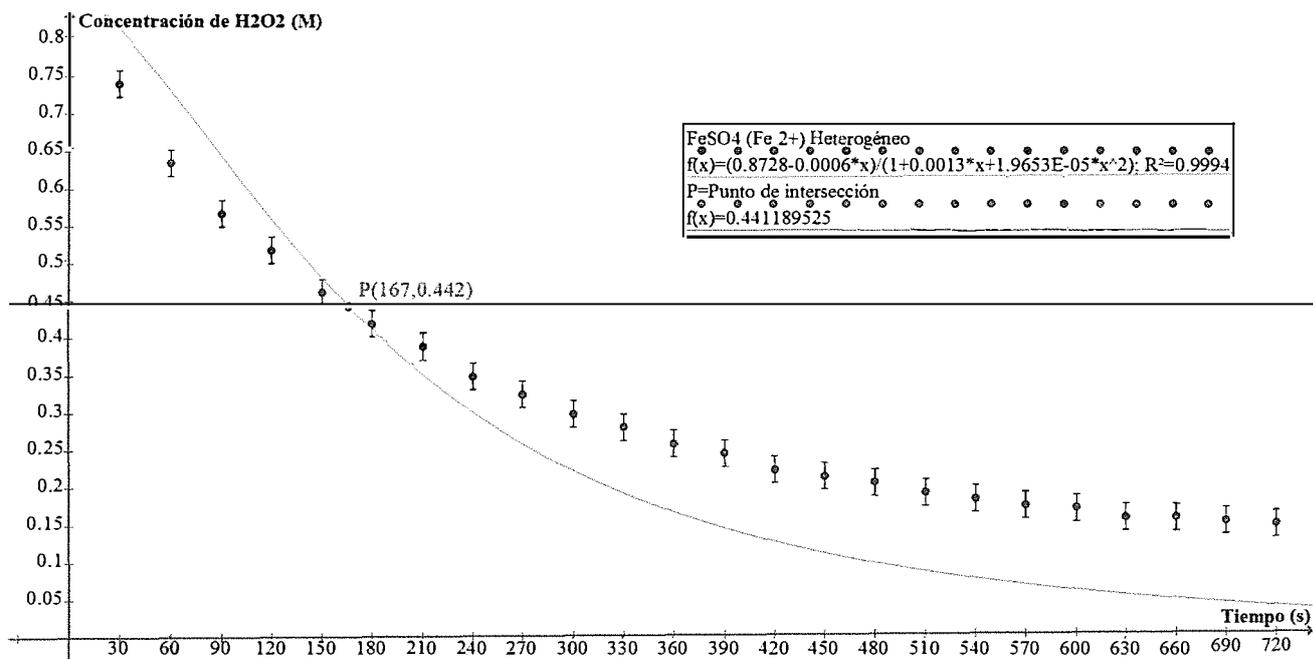
³⁴ Ídem

³⁵ Ídem

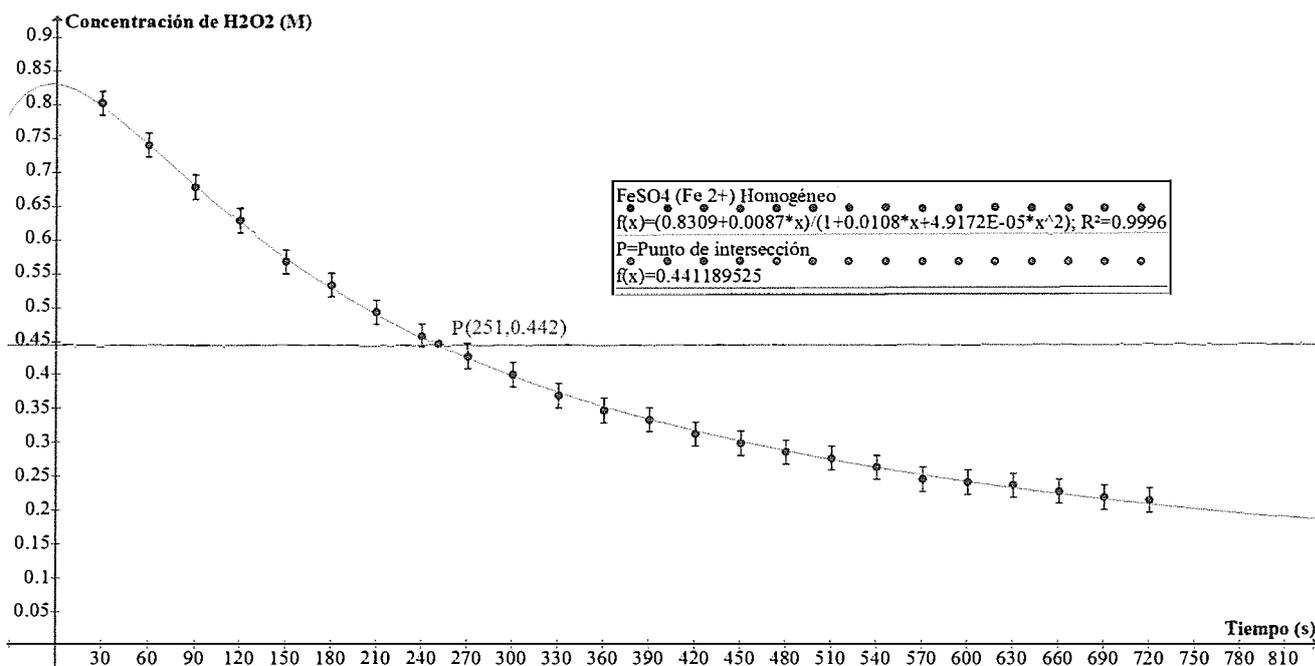
³⁶ Ídem

³⁷ Ídem

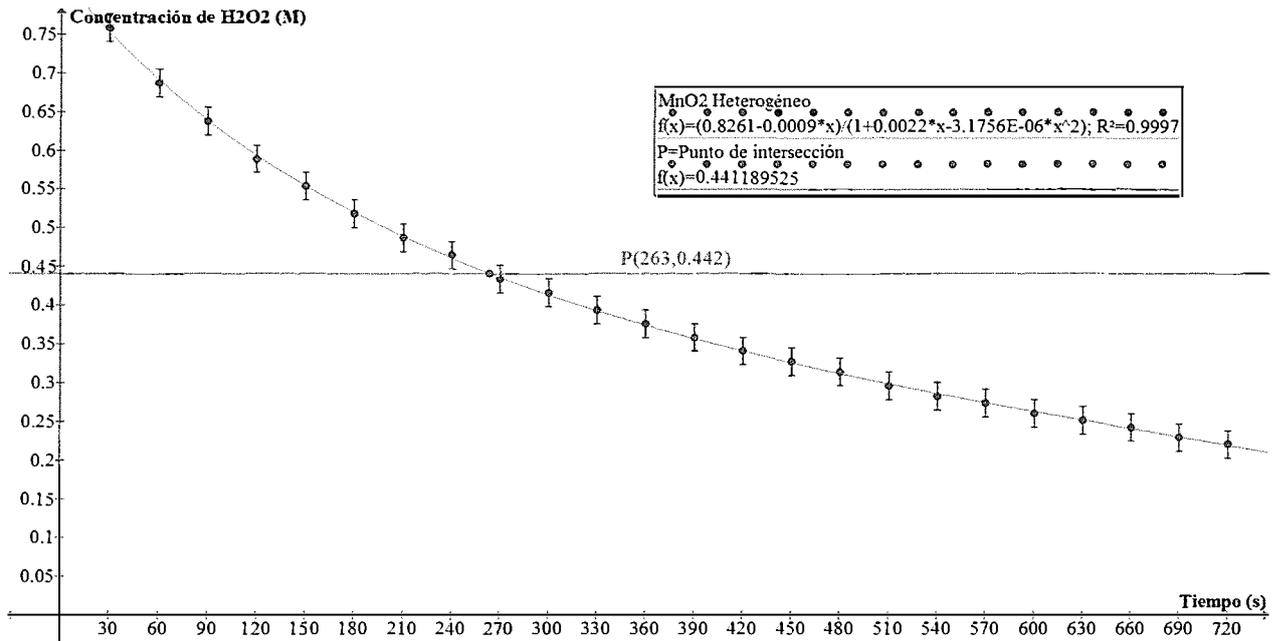
12.1. Apéndice B: Gráficas: cálculo de la vida media



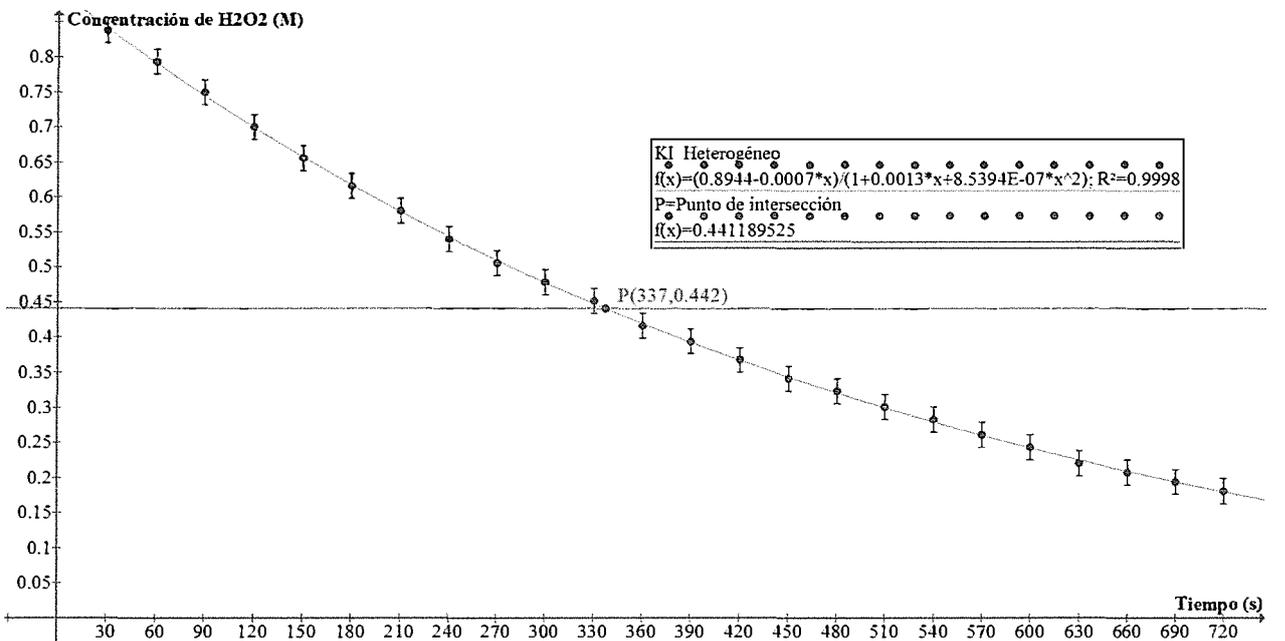
Gráfica 7. Cálculo del periodo de semidesintegración del H₂O₂ bajo efecto del FeSO₄ · 7H₂O heterogéneo.



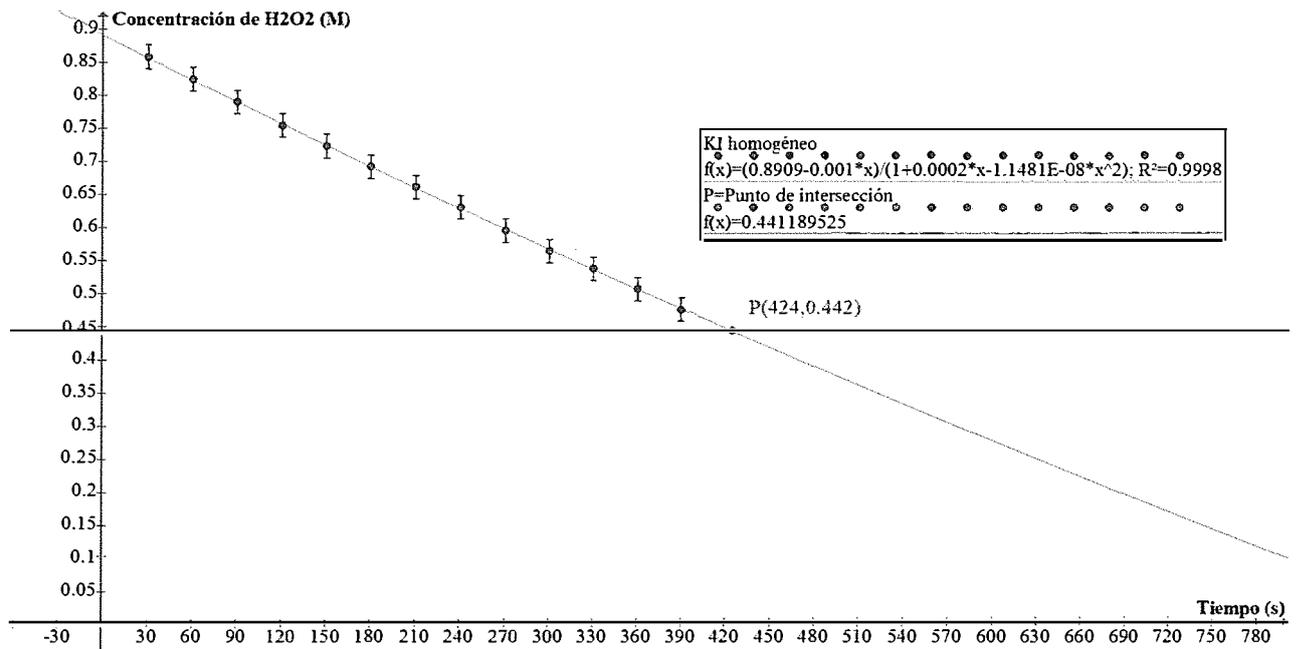
Gráfica 8. Cálculo del periodo de semidesintegración del H₂O₂ bajo efecto del FeSO₄ · 7H₂O homogéneo.



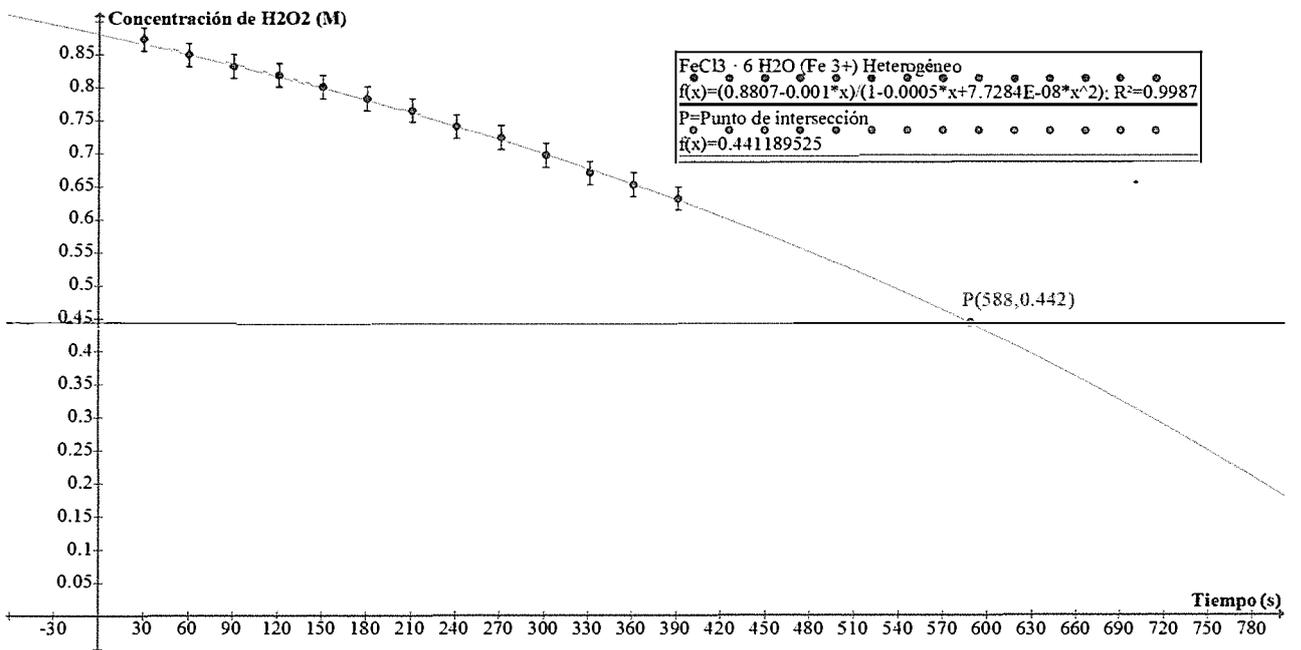
Gráfica 9. Cálculo del periodo de semidesintegración del H₂O₂ bajo efecto del MnO₂ heterogéneo.



Gráfica 10. Cálculo del periodo de semidesintegración del H₂O₂ bajo efecto del KI heterogéneo.



Gráfica 11. Cálculo del periodo de semidesintegración del H₂O₂ bajo efecto del KI homogéneo.



Gráfica 12. Cálculo del periodo de semidesintegración del H₂O₂ bajo efecto del FeCl₃ · 6H₂O homogéneo.