

# ENERGÍA DE ACTIVACIÓN Y VELOCIDAD DE DEGRADACIÓN DE UNA BOLSA BIODEGRADABLE.

## RESUMEN

En esta investigación se abordan y se utilizan algunos temas sobre funciones exponenciales y logarítmicas y su derivada para calcular la velocidad de degradación de la bolsa, así como la ecuación de Arrhenius que es muy importante para determinar experimentalmente la energía de activación ( $E_a$ ) necesaria para que una bolsa de plástico (polietileno) biodegradable se degrade.

Para la realización de este trabajo de investigación, tuvimos la oportunidad de acudir al departamento de polímeros del Instituto de investigaciones en Materiales de la UNAM, ubicado en Ciudad Universitaria. Estuvimos trabajando en la parte de investigación de polímeros con la asesoría externa del Investigador Miguel Ángel Canseco Martínez, del área de Espectroscopia y Análisis Térmico, quien nos ayudó a realizar la parte experimental de la investigación de una bolsa de supermercado, la cual se presume que es biodegradable.

Finalmente, en el salón de clases con la asesoría del profesor de Cálculo Rafael Del Valle Avila, nos propusimos a aplicar los conocimientos sobre la derivada, para calcular la velocidad con la que se degrada la masa de la bolsa con respecto a la temperatura.

## INTRODUCCIÓN

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.

### Marco Teórico

“La ecuación de Arrhenius”

La cinética química se encarga del estudio de la rapidez de una reacción. La velocidad de una reacción química depende de varios factores: concentración de los reactivos, estado físico de estos, utilización de catalizadores o inhibidores y **la temperatura** ocupada durante el proceso. 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<sub>a</sub>** es la energía de activación (KJ mol<sup>-1</sup>), **R** es la constante de los gases y **T** es la temperatura absoluta.

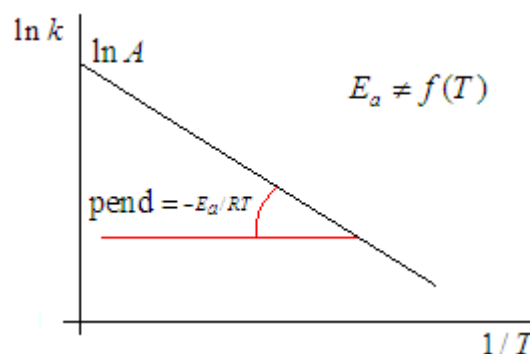
La mayor parte de las reacciones químicas son térmicamente activadas; proceden más rápidas conforme aumenta la temperatura de la mezcla de reacción. Este

comportamiento es típico de las reacciones en las que se debe superar una barrera de energía para que los reactantes se transformen en productos o también se define como la mínima cantidad de energía que se requiere para iniciar una reacción química. A esta barrera nos referimos a la *energía de activación*

El factor de frecuencia **A**, representa la frecuencia de las colisiones entre las moléculas reactivas. El factor  $e^{\frac{-E_a}{RT}}$  representa la fracción de las colisiones moleculares con energía igual o mayor que la energía de activación. Debido a que el factor de frecuencia **A** está relacionado con las colisiones moleculares, este depende de la temperatura. Sin embargo, en un intervalo limitado de temperatura, la variación predominante de la temperatura está considerada en el término exponencial. Al aplicar el logaritmo natural a la ecuación anterior 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  $b = \ln(A) \therefore A = e^b$ .

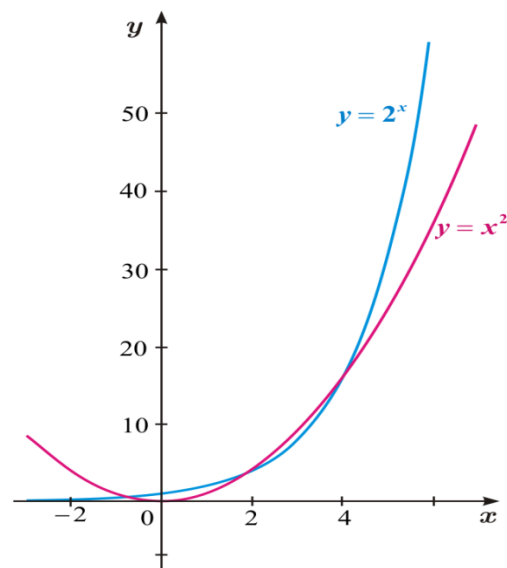
### Funciones Exponenciales y Logarítmicas.

Históricamente, el tema de los logaritmos ha tenido gran relevancia por su aplicación práctica en la simplificación de cálculos numéricos laboriosos y extensos. Aunque en el presente siglo se ha logrado superar ampliamente esta importante dificultad mediante las calculadoras y computadoras, las funciones

logarítmicas son de gran trascendencia y su uso es imprescindible en las ciencias y técnicas de distintos campos. Al igual que puede afirmarse de las funciones exponenciales, por lo cual su estudio es de mucho interés.

Las funciones exponenciales son aquellas, que tienen una base constante y un exponente variable, la base más común es "e" ( $e=2.718281\dots$ ), 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.

La más común de las funciones exponenciales es la de base "e". 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 (sólo para valores muy negativos de "x") 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  $y=1$



Las funciones exponenciales de la forma  $f(x) = a^x$  donde  $a$  es una constante positiva, se utilizan para representar muchos fenómenos en ciencias naturales y sociales. Una función exponencial tiene una razón de cambio relativa (o porcentual constante).

Logaritmo Natural.

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

$$\ln(x) = c \text{ Significa } e^c = x$$

El logaritmo natural también se escribe como  $\log_e(x)$ .

Para trabajar 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 exponencial y logarítmica

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  $\Delta x$  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 limite se denomina derivada de  $f$  en  $x_0$ .

Derivada de  $a^x$  y el numero e

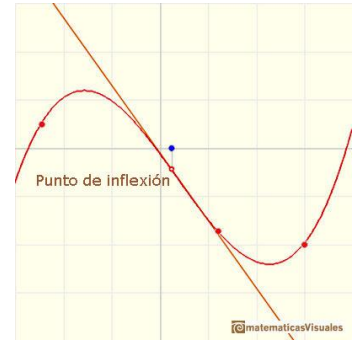
El cálculo de la derivada de  $f(x) = a^x$ , para  $a > 0$ , es semejante al de  $2^x$  y  $3^x$ . Nuevamente, la derivada es proporcional a la función original. Cuando  $a=2$ , la constante de proporcionalidad (0.6931) es menor que 1 y la derivada es menor que la función original. Cuando  $a=3$ , la constante de proporcionalidad (1.0986) es mayor que 1, y la derivada es mayor que la función original.

$$\frac{d}{dx}(a^x) = (\ln a)a^x$$

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:

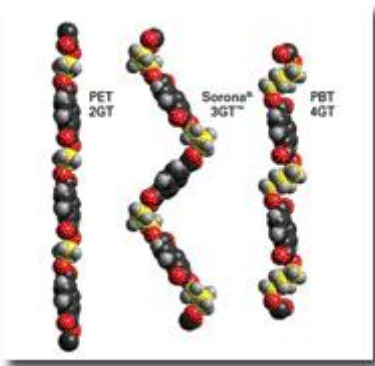
$$\frac{d}{dx}(e^x) = e^x$$

Un punto de inflexión es donde los valores de  $x$  de una función continua que pasa de un tipo de concauidad 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.



## Polímeros

En 1907 se realizó la preparación del primer polímero sintético: la bakelita. Al finalizar la Primera Guerra Mundial el interés en los polímeros creció y surgieron importantes descubrimientos.



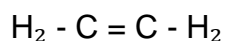
Podemos definir a los polímeros (también llamados homopolímeros), como una macromolécula grande compuesta de muchas unidades más pequeñas (monómeros) unidas entre si. Son sustancias químicas de la naturaleza compuestas por largas cadenas, cuya base son los enlaces de carbono, hidrogeno, oxigeno y nitrógeno. 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 nucleídos, el almidón y la celulosa.

Los polímeros sintéticos se fabrican a través de productos derivados del petróleo, por ejemplo, poliestireno, bakelita, nylon, cloruro de polivinilo, polietileno, entre muchos más.

En esta investigación se trabajara con el polietileno, el cual está constituido a partir del monómero eteno o etileno:



En general, todos los polímeros presentan una elevada inercia de reacción y son intocables por los ácidos y los agentes de la atmosfera. Poseen, asimismo, bajas densidades, son fáciles de teñir y se moldean bien al no tener un punto de fusión determinado, sino una franja de temperatura en la que se convierten en materiales viscosos y blandos.

Hay polímeros de alta y baja densidad. Si hay muchas ramificaciones, el polímero tiene una densidad menor porque la masa ocupa un volumen más grande. Si las cadenas son lineales, se pueden acomodar en un menor volumen y así aumentar la 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.

Los plásticos pueden producirse por polimerización. Hechos por polimerización de adición son el polietileno, el polipropileno, el acetato de polivinilo, el poliestireno y los acrílicos.

### Pruebas de Biodegradabilidad

Existen dos vías para degradar un biopolímero: una aerobia y otra anaerobia, que puede deberse a la acción enzimática de microorganismos, como bacterias, algas y hongos; los cuales transforman los polímeros en su fuente de comida y energía, dando como resultado  $\text{CO}_2$ , biomasa y agua, y un mecanismo de dos etapas, una de hidrolisis o foto degradación, y otra posteriormente de biodegradación. O a un proceso abiótico proceso abiótico, como disolución en agua y envejecimiento por luz o calor.

Además de degradarse, hay plásticos que sirven para nutrir la tierra, es decir compostables. Se desintegran en un sistema de composta. La biodegradación puede llevarse a cabo en diferentes tipos de suelo, tierras de compostaje, plantas de tratamiento de aguas, ambientes marinos e incluso en el cuerpo humano. No todos los materiales son biodegradables bajo todas las condiciones. Algunos solo

son susceptibles a microorganismos, mientras que otros necesitan condiciones ambientales y microorganismos de una composta o del suelo.

De todos los mecanismos de degradación de un plástico, los biodegradables son los únicos que cuentan con estándares y certificados. Para determinar el grado y velocidad de biodegradación de un plástico se estandarizaron diversos métodos, exponiendo los materiales junto con una muestra patrón a distintos ambientes simulados, acelerados regularmente con alta actividad microbiana y controlando diversas condiciones como temperatura, humedad y aeración. Los métodos tienen que ser simples y acercarse lo más posible a fenómenos que pasan en la naturaleza.

### **OBJETIVO DE LA INVESTIGACIÓN**

- Mostrar que la función exponencial tiene un uso importante en objetos que utilizamos diariamente.
- Determinar la Energía de Activación de una bolsa biodegradable mediante la ecuación de Arrhenius.
- Obtener la velocidad con la que se degrada la masa de una bolsa biodegradable con respecto a la temperatura.

### **PROBLEMA**

Obtener experimentalmente la Energía de Activación de una bolsa biodegradable (de tiendas comerciales), así como la velocidad con respecto a la temperatura con la que se degrada.

### **HIPÓTESIS**

La energía de activación de una bolsa biodegradable se puede calcular con la ecuación de Arrhenius.



## DESARROLLO

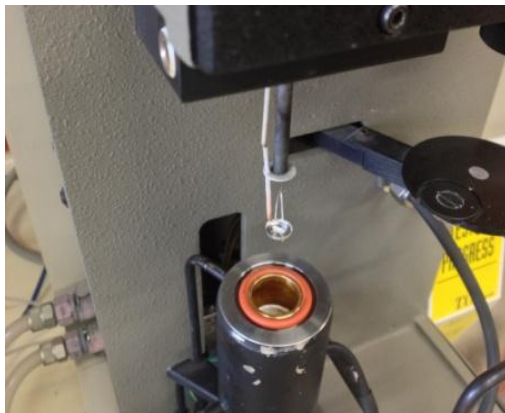
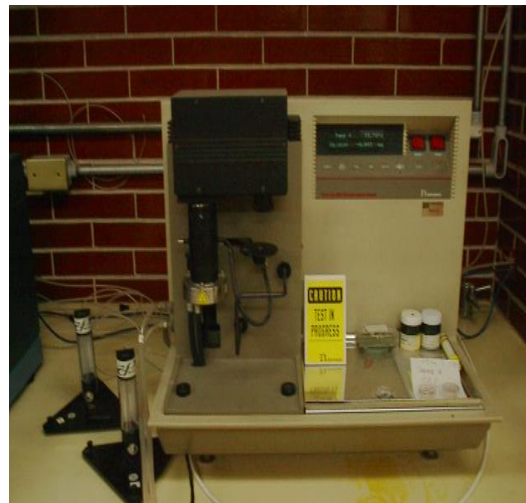
### Materiales:

- 4 muestras de una bolsa biodegradable de aprox. 4.00 mg.
- 1 canastilla de aluminio
- Analizador Termogravimétrico (TGA). Marca T.A. Instruments, modelo 2950.
- Computadora

### Metodología:

Siguiendo el método de la ecuación de Arrhenius, y con la supervisión del asesor, llevamos a cabo el siguiente experimento:

- Primeramente cortamos cuatro muestras de la bolsa que supone ser biodegradable, de aproximadamente 4.00 miligramos de peso.
- Colocamos cada una de las muestras en la pequeña canasta de aluminio.
- Cada muestra fue calentada dentro del horno del Analizador (TGA) en una atmosfera de aire, a diferentes velocidades de calentamiento: 1, 2, 5 y 10 grados Centígrados por minuto, respectivamente.

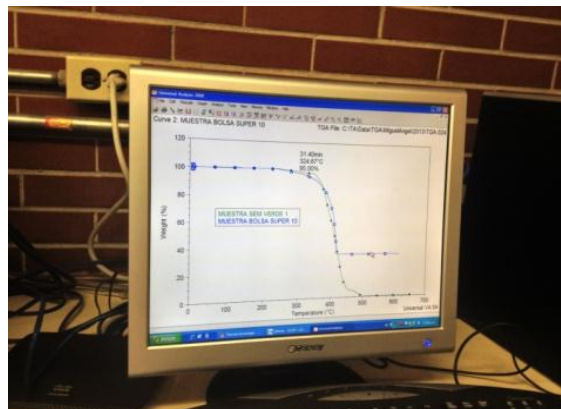


- Las muestras fueron sometidas a más de 400 grados Centígrados, perdiendo así una masa de cerca del 70% de su masa original.

- Finalmente, ya que el Analizador (TGA) nos permite trasladar la información a la computadora, pudimos observar las gráficas resultantes de cada una de las

muestras, en donde aparecen una serie de puntos, obtenidos por el comportamiento del material.

El Analizador (TGA) consta de una sensible balanza, la cual tiene un contrapeso con un peso estable, y por otro lado tiene una pequeña canastilla que va a contener la muestra, y dependiendo de las temperaturas que se alcancen es el material de la canastilla. El siguiente componente del instrumento de medición, es un horno, que se desplaza para cubrir la muestra, este horno consta de una resistencia eléctrica, la cual genera las diferentes temperaturas deseadas. Así mismo, el aparato cuenta con una conexión a una computadora, que por medio de un software especializado nos mostrará todos los datos en forma de gráficas.



## RESULTADOS

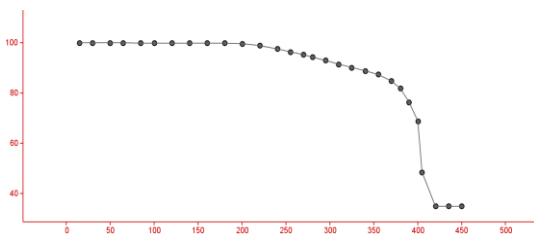
A continuación se muestran las tablas y sus correspondientes gráficas, de la degradación de la masa de la bolsa de cada una de las muestras con respecto a la temperatura. Se fijó un valor de porcentaje de pérdida de masa constante para todas las curvas, en este caso fue de 5% de la masa. En las gráficas también aparece la temperatura a la que pierde este valor. Cada muestra fue calentada dentro del horno del Analizador (TGA) a diferentes velocidades de calentamiento: 1, 2, 5 y 10 (°C/min).

velocidad de calentamiento ( $k=1^{\circ}\text{C}/\text{min}$ )

Temperatura $^{\circ}\text{C}$	Masa %	Temperatura $^{\circ}\text{C}$	Masa %
0		255	96.37
5		270	95.2
10		280	94.31
15	99.99	295	92.92
30	99.97	310	91.46
50	99.92	325	90.13
65	99.91	340	88.91
85	99.88	355	87.35
100	99.87	370	84.74
120	99.86	380	81.78
140	99.88	390	76.33
160	99.85	400	68.84
180	99.79	405	48.59
200	99.7	420	35
220	98.88	435	34.93
240	97.46	450	34.95

y: % Masa

257.94 min  
272.36  $^{\circ}\text{C}$   
95.00%



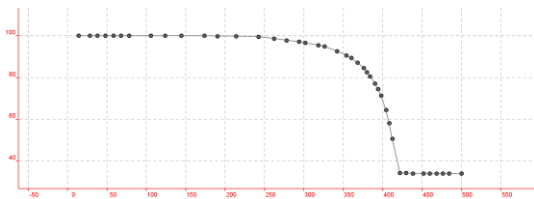
x: Temperatura

velocidad de calentamiento(k=2°C/min)

Temperatura °C	Masa %	Temperatura °C	Masa %
0		302	96.62
2		318	95.58
4		326	94.86
6		342	92.74
8		354	90.74
10		360	89.39
12		368	87.26
14	100.1	376	84.48
28	100	380	82.72
38	100	384	80.7
48	100	390	77.24
58	100	394	74.55
68	100	398	71.33
78	100.1	404	64.51
106	100.1	408	58.12
124	100	412	50.74
144	100	422	34.47
174	99.98	430	34.29
190	99.94	438	34.21
214	99.87	452	34.14
242	99.54	460	34.12
262	98.68	468	34.11
278	97.93	476	34.1
294	97.09	484	34.1
		500	34.1

y: % Masa

135.25min  
282.97°C  
95.00%



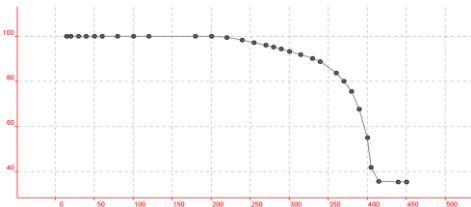
x: Temperatura

velocidad de calentamiento (k=5°C/min)

Temperatura °C	Masa %	Temperatura °C	Masa %
0		270	96.1
5		280	95.26
10		290	94.36
15	100	300	93.39
20	100	315	91.91
30	100	330	90.34
40	100	340	88.92
50	100	360	83.9
60	100	370	80.21
80	100	380	75.58
100	100	390	67.67
120	100.1	400	54.99
180	100.1	405	41.86
200	100.1	415	35.77
220	99.6	440	35.4
240	98.29	450	35.43
255	97.24		

y: % Masa

54.79min  
297.72°C  
95.00%



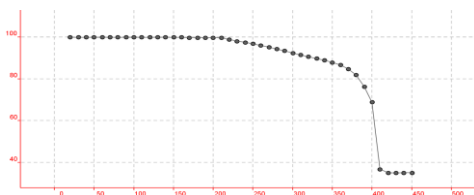
x: Temperatura

velocidad de calentamiento (k=10°C/min)

Temperatura °C	Masa %	Temperatura °C	Masa %
		230	98.14
0		240	97.46
10		250	96.75
20	99.98	260	96
40	99.94	270	95.2
50	99.92	280	94.31
60	99.92	290	93.36
70	99.9	300	92.43
80	99.88	310	91.46
90	99.89	320	90.54
100	99.87	330	89.72
110	99.86	340	88.91
120	99.86	350	87.96
130	99.9	360	86.62
140	99.88	370	84.74
150	99.89	380	81.78
160	99.85	390	76.33
170	99.81	400	68.84
180	99.79	410	36.72
190	99.76	420	35
200	99.7	430	34.94
210	99.69	440	34.96
220	98.88	450	34.95

y: % Masa

31.40min  
324.67°C  
95.00%



x: Temperatura

## OBTENCIÓN DE LA ENERGÍA DE ACTIVACIÓN ( $E_a$ ) Y DEL FACTOR DE FRECUENCIA (A).

En la tabla resumimos la información obtenida.

<i>Velocidad (k) °C</i>	<i>Temperatura (T)°C</i>	<i>velocidad(k) °C</i>	<i>°K=(°C + 273.15)</i>	<i>1/T °K</i>	<i>ln k(°C/min)</i>
1 °C/min	272.36 °C	274.15 °C/min	545.51°K/min	0.0018331	5.61367
2 °C/min	282.97 °C	275.15°C/min	556.12°K/min	0.0017981	5.61742
5 °C/min	297.72 °C	278.15 °C/min	570.87°K/min	0.0017517	5.62826
10 °C/min	324.67 °C	283.15°C/min	597.82°K/min	0.0016727	5.64597

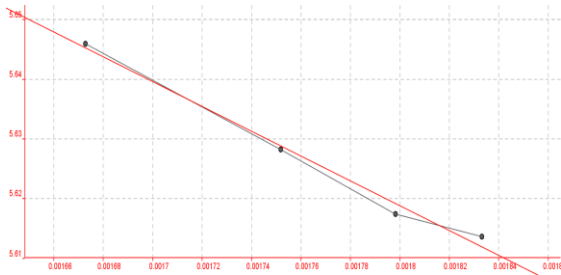
Para obtener la ecuación de Arrhenius en forma lineal, elaboramos la siguiente tabla, tomando los valores de las dos últimas columnas de la tabla anterior:

$\frac{1}{T^{\circ}K}$	$\ln(k) \left( \frac{^{\circ}C}{min} \right)$
0.0018331	5.31367
0.0017981	5.61742
0.0017517	5.62826
0.0016727	5.64597

Al graficar los datos  $1/T^{\circ}K$  y  $\ln(k)(^{\circ}C/min)$ , 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.

El grafico muestra la relación entre  $x= 1/T^{\circ}K$  e  $y= \ln(k) ^{\circ}C/min$

$y: \ln(k) ^{\circ}C/min$



$x: \frac{1}{T ^{\circ}K}$

### Método de mínimos cuadrados

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

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  $n= 4$ :

$$\sum xy = 0.039694138; \quad \sum x = 0.0070556; \quad \sum y = 22.50532 \quad \text{y} \quad (\sum x)^2 = 0.000012459$$

Sustituyendo los valores en  $m$ , se tiene:



$$m = \frac{4(0.039694138) - (0.0070556)(22.50532)}{4(0.000012459) - (0.0070556)^2} = \frac{0.158776553 - 0.158788535}{0.000049836 - 0.000049781}$$

$$m = \frac{-0.000011983}{0.000000054} = -221.9074074$$

Por lo que la pendiente es igual a: **m = - 221.9074074**

Sustituyendo los valores en "b" se tiene

$$b = \frac{(22.50532) - (-221.9074074)(0.0070556)}{4} = \frac{(22.50532) + (1.565689904)}{4}$$

$$b = \frac{(24.0710099)}{4} = 6.01775$$

Por lo que la ordenada al origen es igual a: **b= 6.01775**

La ecuación de la recta es: **y = -221.9074074 x + 6.01775**

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

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

Sustituyendo  $R = 8.3143$  (Constante) se tiene  $-221.9074 = \frac{-E_a}{8.3143}$

Es decir  $-E_a = -221.9074(-8.3143)$

Por lo tanto **Ea = 1836.6903  $\frac{J}{mol}$  (Energía de activación)**

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

$6.01775 = \ln(A)$  ;  $e^{6.01775} = A$

Por lo tanto **A = 410.6535 (frecuencia de las colisiones entre las moléculas reactivas)**

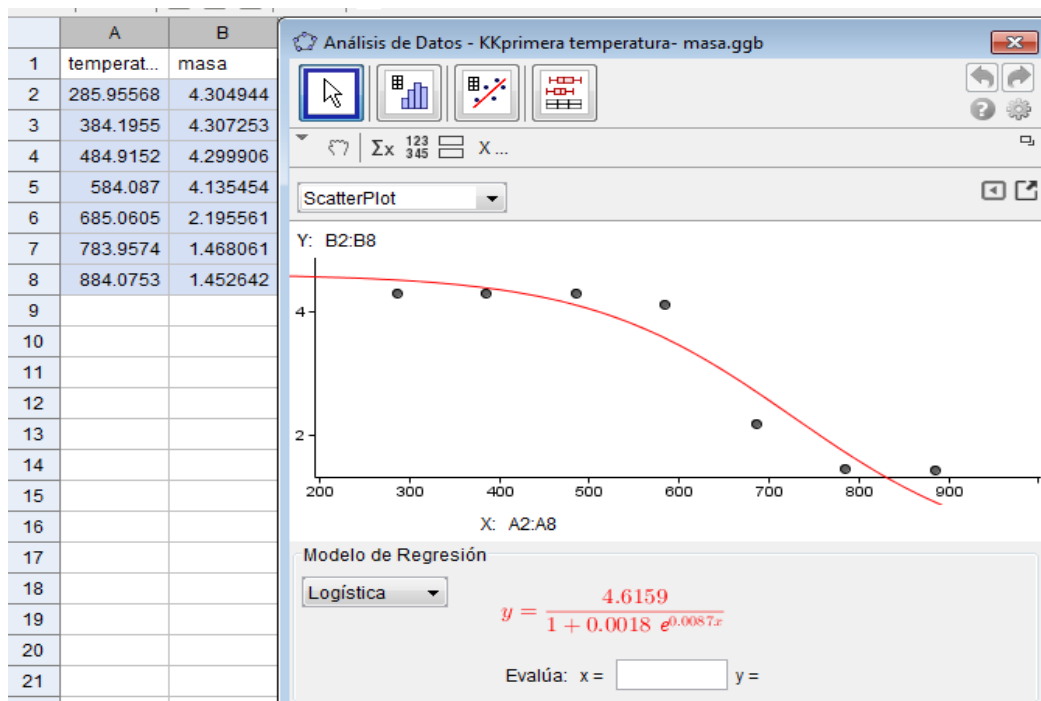
## LA FUNCIÓN EXPONENCIAL COMO MODELO DEL COMPORTAMIENTO DE DEGRADACION DE LA MASA DE LA BOLSA CON RESPECTO A LA TEMPERATURA.

Los resultados del análisis termogravimétrico (TGA), muestran las gráficas de la degradación de la masa de la muestra con respecto a la temperatura. La forma de variación que aparece en las curvas tiene las características 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 **y** (en mg) con respecto a la temperatura **x** (en °K), se elaboró la gráfica del comportamiento de la masa de la bolsa (aprox. 4.3 mg), cuando el horno del Analizador (TGA) calienta la muestra con una velocidad de 10°C/min, como se muestra en la siguiente gráfica.

Gráfica de la degradación de la masa con la temperatura.



En la gráfica se observa que la función exponencial  $f(x) = \frac{4.6159}{1+0.0018e^{0.0087x}}$  modela 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:

$$A = 4.6159; \quad B = 0.0018; \quad C = 0.0087$$

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

$$f(x) = \frac{A}{1 + Be^{Cx}} \quad \text{Donde:} \quad \mathbf{x} \text{ es la temperatura en } ^\circ\text{K}$$

**f** es la masa de la bolsa en miligramos

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:

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{-(4.6159)(0.0018)(0.0087)e^{0.0087x}}{(1 + 0.0018 e^{0.0087x})^2}$$

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{-(0.0000722)e^{0.0087x}}{(1 + 0.0018 e^{0.0087x})^2} \quad \frac{mg}{^\circ\text{K}} \quad \text{velocidad de degradación}$$

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 °K	Velocidad $f'(x)$ en $\text{mg}/^\circ\text{K}$
400	$-2.09 \times 10^{-3}$
500	$-4.31 \times 10^{-3}$
600	$-7.52 \times 10^{-3}$
700	$-9.9 \times 10^{-3}$
800	$-9.07 \times 10^{-3}$
900	$-5.95 \times 10^{-3}$
1000	$-3.11 \times 10^{-3}$

En la tabla se observa que aproximadamente en  $x = 700^\circ\text{K}$ , está el valor máximo de la velocidad. 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):

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

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

Factorizando:

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

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

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

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

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:

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

Sustituyendo los valores de B y C se tiene:

$$x = \frac{\ln\left(\frac{1}{0.0018}\right)}{0.0087} = \frac{\ln(555.55)}{0.0087} = \frac{6.319}{0.0087}$$

$$x = 726.43 \text{ } ^\circ K \text{ temperatura en la cual la velocidad es máxima}$$

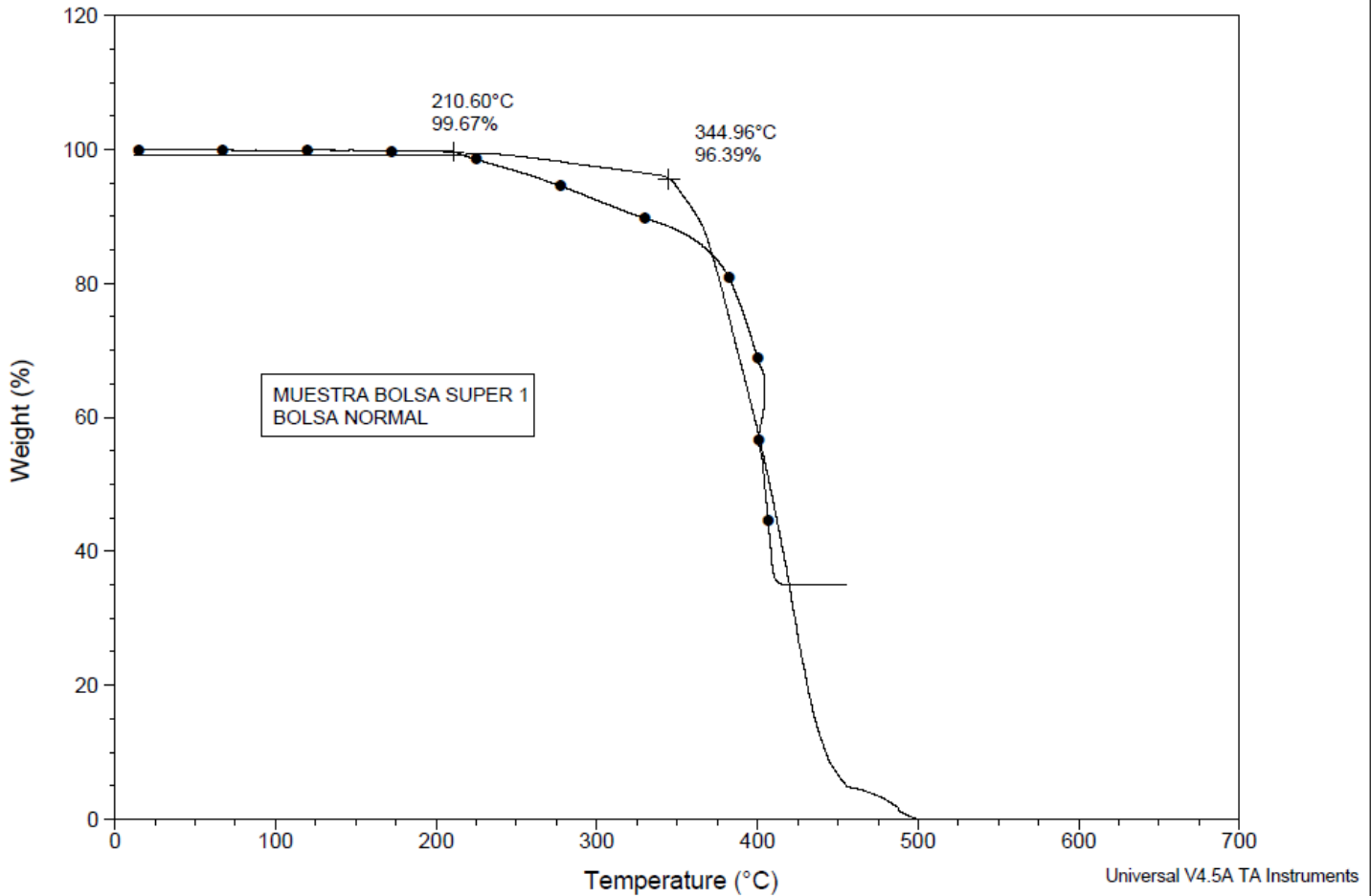
La velocidad máxima de degradación de la masa de la bolsa es:

$$f'(453.752) = -10.03 \times 10^{-3} \frac{mg}{^\circ K}$$

## CONCLUSIONES

Como conclusión diremos que el estudio térmico de los materiales proporciona información que se emplea para determinar algunas propiedades de los materiales. Asimismo se predicen algunas propiedades y el comportamiento que tendrán bajo ciertas condiciones de operación y se puede inferir el comportamiento de estos ante cambios de temperatura, ya sea para mejorar su procesamiento con el fin de impartirle mejores propiedades.

Grafico que muestra la degradación de una bolsa común y una biodegradable.



Finalmente con la investigación realizada y observando la grafica anterior se puede interpretar que para la degradación de la bolsa biodegradable en comparación con una bolsa común, la energía de activación, va a ser de menor magnitud que para una bolsa biodegradable, ya que si la Energía de Activación( $E_a$ ), depende de la temperatura, y si en la grafica se muestra que la bolsa común necesita más temperatura para que su masa comience a degradarse, entonces la energía de activación será mayor, es decir,  $E_a$  es proporcional a  $T$ , ya que si la temperatura aumenta, también lo hará la Energía de activación.

Respecto a la velocidad con la que se degrada la bolsa, si existe una temperatura alta o mayor, la velocidad de degradación de la masa (para cualquier bolsa) será más rápida, debido a que si se tiene una temperatura constantemente baja, en comparación con una temperatura alta constante, la degradación de la masa de la bolsa será más rápida a una temperatura alta, determinando el punto de inflexión, (igualando a cero nuestra segunda derivada de la función variación de la masa con respecto a la (temperatura)) este representará el valor de la velocidad máxima con la que se degrada la masa de una bolsa.

### **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. Mendelson, Elliot. Cálculo, "La derivada", Mc Graw Hill, México, 2010, pp. 72.

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

Chang, Raymond, et.al. Física Química. "La ecuación de Arrhenius". McGraw 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.

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

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