

ESTEQUIOMETRÍA DE REACCIONES QUÍMICAS: USO DE LA MATRIZ INVERSA PARA BALANCEAR ECUACIONES QUÍMICAS

Juan Vargas M.^(*), Tatiana Urzúa Ll.^(**), Nelson Aravena C.^(***)

Resumen

Los métodos utilizados para balancear ecuaciones químicas son adecuados cuando las reacciones son simples. Además, su aplicación no da cuenta que para una misma ecuación química pueden obtenerse más de un conjunto de números estequiométricos. Este trabajo muestra cómo el método cómputo-algebraico Maple VIII y la aplicación de la matriz inversa son una alternativa que facilita su resolución e interpretación.

Palabras claves: Ajuste de ecuaciones químicas, Maple VIII, matriz inversa.

Abstract

The methods used balance chemical equations are adequate if the reactions are simple. Besides, their applications do not realize that for a same chemical equation it could be obtained more than a set of stoichiometrical numbers. This work shows how the Maple VIII algebraic compute method and the inverse matrix application are an alternative which facilitates its solution as well as its interpretation.

Key words: Chemical equations adjustment, Maple VIII, Inverse matrix.

Introducción

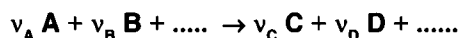
El álgebra lineal es una rama importante de la matemática moderna, con una teoría sólida que proporciona modelos matemáticos, es decir, "representaciones" matemáticas de problemas provenientes de las ciencias naturales (Química, Física y Biología), ingenierías, ciencias sociales y del comportamiento. Dentro de los métodos y técnicas que el álgebra lineal ofrece se encuentra el cálculo de la inversa de una matriz cuadrada con determinante no nulo, que está asociado íntimamente a la resolución de ciertos sistemas de

ecuaciones lineales. Esta cooperación enriquece los ámbitos de la enseñanza de las ciencias y permite resolver problemas prácticos.

El tema Estequiometría de Reacciones Químicas es una unidad básica en los cursos de Química de pregrado universitario de la mayoría de las carreras científicas relacionadas con el campo de la química. El método de tanteo, matemático y redox (en diferentes ambientes) que habitualmente se utilizan para balancear ecuaciones químicas, resultan adecuados cuando las reacciones son simples, no así, cuando tienen un cierto grado de complejidad y además no discriminan sobre la posibilidad que para una misma ecuación química puedan obtenerse más de un conjunto de números estequiométricos (Miseen, 1999). La finalidad de este trabajo, es mostrar cómo el método cómputo-algebraico como es Maple VIII, representa una alternativa que permita superar estas limitaciones (Roanes, 1999).

Metodología

Una ecuación química corresponde a la representación simbólica de una reacción química, se utilizan fórmulas químicas para representar las sustancias participantes (reaccionantes y productos), las cuales se encuentran afectadas por números llamados números estequiométricos (tradicionalmente conocidos como coeficientes estequiométricos), que permiten que el número de átomos del lado izquierdo de la ecuación sea igual al número de átomos del lado derecho. En general una reacción química se representa por la siguiente ecuación química:



Donde A, B, C y D son las sustancias participantes de la reacción química; A y B son las sustancias iniciales que van a reaccionar (reaccionantes); C y D son las sustancias resultantes de la reacción química (productos) y v_A , v_B , v_C y v_D son los

^(*) Departamento de Química, ^(**) Departamento de Física, ^(***) Departamento de Matemática. Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Metropolitana de Ciencias de la Educación (UMCE). j.vargas@umce.cl

números estequiométricos y la flecha \rightarrow se utiliza para señalar un proceso de cambio. La ecuación química para un número de participantes cualquiera, se puede representar como:

$$\sum v_i A_i = 0$$

Conocida la ecuación química, corresponde ajustar la ecuación, es decir, colocar los números estequiométricos que afectarán a cada participante, sean reaccionantes o productos de la reacción. En este trabajo se propone el uso del cálculo matricial para encontrar los números estequiométricos de una ecuación química, aplicando el método de la matriz inversa usando Maple VIII. Se aplica para ecuaciones en que los participantes son neutros o con cargas eléctricas y para diferentes tipos de reacciones químicas: reacciones ácido-base, reacciones de óxido-reducción, de precipitación y formación de compuestos de coordinación. La ecuación química puede también ser representada por:

$$\sum a_{ij} v_i = 0$$

donde **A** representa cada átomo *j* participante en la sustancia *i* con número estequiométrico *i*. En una reacción química cualquiera, siempre estarán participando un número *M* átomos de diferentes tipos y un cierto número *N* de sustancias químicas. En general, cuando se considera todos los átomos *M* y las *N* sustancias químicas participantes, esto representa una serie de *M* de ecuaciones simultáneas con *N* elementos cuya suma total es igual a cero. La matriz descripción puede ser representada por:

$$A v = 0$$

donde **A** tiene *M* filas y *N* columnas y **v** tiene *N* filas y un número de columnas igual al número de soluciones independientes de la ecuación, que representa la matriz de los números estequiométricos correspondientes.

Para determinar la matriz **v** se puede realizar por dos caminos, uno es calcular el espacio nulo de la matriz **A**; otro camino es el cálculo de la matriz inversa de **A**. La inversa de la matriz **A** puede ser determinada calculando la matriz adjunta de **A**. El producto de la adjunta de **A** por la matriz **A** debe ser igual al determinante de **A** por la matriz identidad.

$$\text{Adj } A \times A = A \times I$$

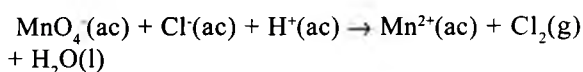
Si **A** es una matriz cuadrada, tal que $|A| \neq 0$, entonces la matriz inversa es:

$$A^{-1} = |A|^{-1} \times \text{adj } A$$

Una matriz **A** de descripción, por ejemplo de 6×6 , que es común encontrar en química, requiere resolver manualmente 14400 determinantes de 3×3 , necesarios para obtener la adjunta de **A**. Este cálculo hoy día no se justifica.

Resultados y discusión

El siguiente ejemplo ilustra su aplicación. Dada la siguiente ecuación química.



La matriz de descripción es:

	MnO ₄ ⁻	Cl ⁻	H ⁺	Mn ²⁺	Cl ₂	H ₂ O
Mn	1	0	0	1	0	0
O	4	0	0	0	0	1
Cl	0	1	0	0	2	0
H	0	0	1	0	0	2
e ⁻	-1	-1	+1	+2	0	0

(*) *cargas eléctricas*

La matriz de descripción contiene *N* sustancias químicas y *M* átomos diferentes. La diferencia $N-M = 1$, indica que existe sólo una solución independiente. Para que la matriz sea cuadrada se agrega el vector unidad correspondiente. Aplicando Maple, se tiene:

> with(linalg):

> C:= matrix ([[1,0,0,1,0,0], [4,0,0,0,0,1], [0,1,0,0,2,0], [0,0,1,0,0,2], [-1

> ,-1,1,2,0,0], [0,0,0,0,0,1]]);

$$C := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 2 \\ -1 & -1 & 1 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

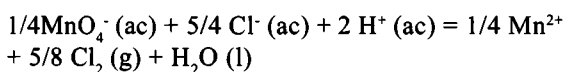
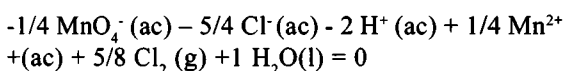
> M:=inverse(C);

$$M := \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{4} \\ 2 & -\frac{3}{4} & 0 & 1 & -1 & -\frac{5}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -2 \\ 1 & -\frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \\ -1 & \frac{3}{8} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{5}{8} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

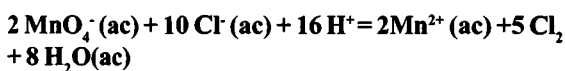
> col(M,6);

$$\left[-\frac{1}{4}, -\frac{5}{4}, -2, \frac{1}{4}, \frac{5}{8}, 1 \right]$$

Esta columna (matriz v) corresponde a la columna de los números estequiométricos. Reemplazando en la ecuación química se tiene:

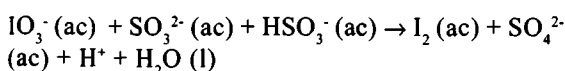


Finalmente multiplicando la ecuación por 8, se obtiene la siguiente ecuación final.

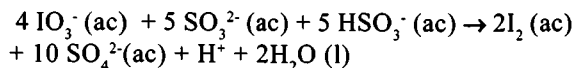


Se puede comprobar que la adjunta de C (N) multiplicada por la matriz C corresponde al producto del determinante de C y la matriz unidad correspondiente. El inverso del determinante de C multiplicada por la adjunta es igual a la inversa correspondiente.

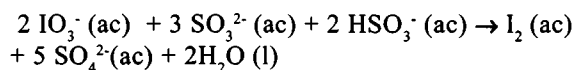
Si tenemos la siguiente reacción química: En medio ácido al tratar yodato (IO_3^-) con sulfito (SO_3^{2-}) y bisulfito (HSO_3^-), se forma Iodo (I_2) y sulfato (SO_4^{2-}). Esta reacción química es representada por la siguiente ecuación química:



El "método matemático" muestra sólo una solución:



La matriz de descripción de este sistema químico, contiene N sustancias químicas, en este caso siete, y M átomos diferentes, en este caso cuatro, que considerada las cargas eléctricas hacen para M un total de cinco. La diferencia entre $N-M=2$, indicaría que en este sistema existe una matriz n que contiene dos soluciones independientes, dadas por las últimas dos columnas de la matriz inversa y que representan los números estequiométricos de dos ecuaciones que son independientes entre sí. El resultado es el siguiente:



El resultado anterior permite concluir que en este sistema químico existen dos reacciones químicas que corresponden a las dos soluciones independientes. Tal sistema también puede ser descrito como una combinación lineal de estas dos soluciones independientes. Desde el punto de vista químico, la primera ecuación representa una reacción de óxido-reducción y la segunda ecuación una reacción en estado de equilibrio que coexiste con la primera.

Conclusiones

La metodología señalada puede aplicarse a cualquier tipo de ecuación química, que puede representar a la diversidad de reacciones químicas que se conocen. El método se ha trabajado con éxito con estudiantes de pre-grado de la carrera de Pedagogía en Química de la UMCE.

Bibliografía

Missen, R.W., Mims C.A. and Saviie B.A., "Introduction to Chemical Reaction Engineering and Kinetics", John Wiley & Sons, 1999.

Roanes L. Ed. Rubiños S.A. Madrid. España. 1999.