

# Matemáticas y Química: Una Mirada a la Cinética Química desde la Matemática

**Faustino Sánchez Garduño**  
Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias,  
Universidad Nacional Autónoma de México

faustino@servidor.unam.mx



**Matemática Aplicada y su Enseñanza**  
Licenciatura – Ciencias de la Vida

Coordinadores de la serie

Dr. Fernando Brambila Paz  
Departamento de Matemáticas,  
Facultad de Ciencias. UNAM.

Dr. Alejandro J. Díaz Barriga Casales  
Instituto de Matemáticas,  
UNAM.

QA39 .3  
S211

Sánchez Garduño, Faustino.

Matemáticas y química: una mirada a la cinética química desde la  
matemática / Faustino Sánchez Garduño. - - México: Centro de Investigación  
en Matemáticas - Sociedad Matemática Mexicana, 2004.

p. 159 + XVI ; 23 cm. il., gráficas. - - (Matemática Aplicada y su Enseñanza,  
Nivel Licenciatura; Tema Ciencias de la Vida)

ISBN 968-5733-02-3.

Contiene Apéndices.

1. Geometría Combinatoria.

ISBN 968-5733-02-3

©D.R. Centro de Investigación en Matemáticas, A.C.

Jalisco s/n, Mineral de Valenciana,  
36240 Guanajuato, Gto., México

©D.R. Sociedad Matemática Mexicana

Circuito exterior s/n, área de la investigación científica,  
Ciudad Universitaria. C.P. 04510 MEXICO D.F.

Este libro no puede ser reproducido total ni parcialmente, por ningún medio electróni-  
co o de otro tipo, sin autorización escrita del editor.

This book may not be reproduced, whole or in part, by any means, without written  
permission from the publisher.

Cuidado de edición: *Ana Elena Uribe Flores y Hernán González Aguilar*

Diseño de portada: *Odalмира Soto Alvarado*

Impreso por: *S y G Editores, S.A. de C.V.*

Cuapinol 52, Santo Domingo de los Reyes, Coyoacán  
04369 - México, D.F.

# Índice general

Índice de Figuras	v
Presentación de la Serie “Matemática Aplicada y su Enseñanza”	IX
Presentación “Ciencias de la Vida”	XI
<b>1. Las primeras piedras</b>	<b>1</b>
1.1. La química en procesos vitales . . . . .	2
1.2. Las bases para la descripción . . . . .	4
1.2.1. La ley de acción de masas, su enunciado . . . . .	4
1.2.2. Su formulación matemática . . . . .	6
1.3. La componente empírica . . . . .	8
1.4. Problemas y ejercicios . . . . .	10
<b>2. Reacciones simples I</b>	<b>13</b>
2.1. Reacciones de orden cero . . . . .	15
2.2. Reacciones de primer orden . . . . .	17
2.2.1. El ajuste a los datos . . . . .	21
2.2.2. Ejemplo 2.1. El análisis de unos datos . . . . .	23
2.2.3. Ejemplo 2.2. El fechamiento de restos fósiles . . . . .	26
2.3. Reacciones de segundo orden . . . . .	30
2.3.1. El empirismo . . . . .	33
2.4. Algo sobre reacciones reversibles . . . . .	35
2.4.1. Las de primer orden . . . . .	36
2.4.2. Las de segundo orden . . . . .	36
2.4.3. Reacciones paralelas . . . . .	37

2.5. Problemas y ejercicios . . . . .	38	6.2.1. Local . . . . .	84
<b>3. Reacciones simples II</b>	<b>41</b>	6.2.2. Global . . . . .	86
3.1. Reescribiendo las leyes cinéticas . . . . .	43	6.3. Problemas y ejercicios . . . . .	89
3.1.1. La de orden cero . . . . .	43	<b>7. La reacción de los patrones</b>	<b>91</b>
3.1.2. La de primer orden . . . . .	44	7.1. Un poco de historia . . . . .	91
3.1.3. Ejemplo 3.1 . . . . .	47	7.1.1. Boris Pávlovich Belusov . . . . .	92
3.1.4. Las de segundo orden . . . . .	49	7.1.2. La onda desdeñada . . . . .	92
3.2. Problemas y ejercicios . . . . .	52	7.1.3. El metabolismo en un tubo . . . . .	93
<b>4. La temperatura en la cinética</b>	<b>55</b>	7.1.4. La triste historia . . . . .	94
4.1. Un paréntesis necesario . . . . .	56	7.1.5. Para fortuna de lo no lineal . . . . .	95
4.1.1. Ahora la gráfica de la concentración “vive” en $\mathbf{R}^3$ . . . . .	56	7.2. Patrones bidimensionales . . . . .	96
4.1.2. Los cambios parciales . . . . .	56	7.2.1. Patrones tipo “blanco” . . . . .	96
4.2. Ley de Arrhenius . . . . .	57	7.2.2. Las espirales en movimiento . . . . .	97
4.2.1. Svante August Arrhenius . . . . .	57	7.3. Patrones en tres dimensiones . . . . .	98
4.2.2. La ley . . . . .	58	7.3.1. Las ondas enrolladas . . . . .	98
4.3. ¿Y el valor de los parámetros, qué? . . . . .	61	7.3.2. Onda enrollada toroidal . . . . .	100
4.3.1. Ejemplo 4.1 . . . . .	62	7.3.3. Las ondas del corazón . . . . .	100
4.3.2. Moraleja . . . . .	63	7.4. Los mecanismos de la reacción de B-Z . . . . .	101
4.4. Problemas y ejercicios . . . . .	63	7.4.1. La química . . . . .	101
<b>5. Algo sobre cinética enzimática</b>	<b>67</b>	7.4.2. El modelo para la reacción homogénea . . . . .	104
5.1. El mecanismo de Michaelis-Menten . . . . .	68	7.4.3. Un resumen de los resultados . . . . .	105
5.1.1. Leonor Michaelis y Maude Lenora Menten . . . . .	68	7.4.4. La componente espacial en los modelos . . . . .	108
5.1.2. La ecuación de Michaelis—Menten . . . . .	69	7.4.5. Una receta para la sopa . . . . .	110
5.1.3. Enderezando a una curva . . . . .	73	7.5. Problemas y ejercicios . . . . .	111
5.2. Las enzimas inmovilizadoras . . . . .	74	<b>Epílogo</b>	<b>115</b>
5.3. Problemas y ejercicios . . . . .	76	<b>A. Reglas de derivación</b>	<b>119</b>
<b>6. Las oscilaciones de Lotka</b>	<b>79</b>	A.1. La derivada de la suma de dos funciones . . . . .	119
6.1. Su mecanismo . . . . .	79	A.2. La derivada de la función constante . . . . .	120
6.1.1. Alfred James Lotka . . . . .	79	A.3. La derivada de $ku(x)$ . . . . .	120
6.1.2. Algunos antecedentes . . . . .	80	A.4. La derivada de la función $f(x) = x^n$ . . . . .	121
6.1.3. Lotka <i>vs</i> Volterra . . . . .	81	A.4.1. $n$ es entero positivo . . . . .	121
6.1.4. Las reacciones . . . . .	82	A.4.2. $n$ es entero negativo . . . . .	122
6.2. Análisis cualitativo . . . . .	83	A.4.3. $n$ es un número racional . . . . .	124
		A.5. La derivada del producto . . . . .	125

A.6. La derivada del cociente . . . . .	128
A.7. La derivada de la raíz cuadrada . . . . .	128
A.8. La regla de la cadena . . . . .	129
A.9. La derivada de la función logaritmo . . . . .	131
A.10. La derivada de la función exponencial . . . . .	132
<b>B. Derivada y crecimiento</b>	<b>135</b>
<b>C. Cambios parciales y aproximaciones</b>	<b>139</b>
C.1. Por gráfica una sábana . . . . .	139
C.2. Los cambios parciales . . . . .	142
C.3. Las aproximaciones locales . . . . .	146
C.4. Los puntos críticos . . . . .	148
<b>D. La regresión lineal</b>	<b>151</b>
D.1. La recta de mínimos cuadrados . . . . .	152
D.2. Extensiones inmediatas . . . . .	154
<b>Bibliografía</b>	<b>157</b>

## Índice de figuras

1.1. La cantidad de calor contenida en un gramo de agua como función de la temperatura. . . . .	11
2.1. Dependencia de la concentración con el tiempo, en reacciones de orden cero. . . . .	17
2.2. Determinación de los parámetros en reacciones de primer orden: a) Dependencia de la concentración con el tiempo si el orden es uno. b) Si la reacción es de orden uno, $\ln[A(t)]$ depende linealmente de $t$ . . . . .	21
2.3. a) Para todo fin práctico, las predicciones del modelo (+) coinciden con los puntos experimentales (o). b) Siempre que el orden sea uno, la velocidad de la reacción depende linealmente de la concentración del reactivo. . . . .	25
2.4. Determinación de los parámetros en reacciones de segundo orden: a) Dependencia del inverso de la concentración con el tiempo. b) Así cambia la concentración con el tiempo en reacciones de segundo orden. Aquí $t^* = -1/k[A_0]$ . . . . .	35
3.1. La concentración, $[A(t)]$ , depende linealmente de la cantidad de producto, $x(t)$ . . . . .	42
3.2. a) La velocidad de formación del producto es constante. b) Así aumenta la cantidad de producto en reacciones de orden cero. . . . .	44
3.3. Otra forma de ver a las reacciones de primer orden: a) Dependencia lineal de la velocidad con la cantidad de producto. b) En trazos continuos se ve el aumento de la cantidad de producto en reacciones de orden uno. . . . .	46

3.4.	a) Vaciado de los datos experimentales de la Tabla 3.1. b) Recta de mínimos cuadrados para determinar los parámetros $a_0$ y $k$ en (3.9).	48
3.5.	La velocidad de la reacción calculada con (3.12) usando los: datos experimentales ( $\bullet$ ), valores que predice la fórmula (3.11), ( $\circ$ ).	49
3.6.	a) En una reacción de segundo orden con un solo reactivo, así cambia la velocidad. La reacción termina cuando $x = a_0$ . b) En una reacción de segundo orden, así aumenta el producto. La recta punteada tiene por ecuación $t \equiv -1/k_2a_0$ .	51
4.1.	Svante August Arrhenius (1859-1927).	57
4.2.	Ley de Arrhenius: así cambia $k$ al aumentar $T$ .	59
5.1.	(a) Leonor Michaelis (1875-1949). (b) Maude Lenora Menten (1879-1960).	68
5.2.	Ley de Michaelis-Menten: a) Dependencia de la velocidad $V$ del sustrato $[S]$ . b) Una transformación la vuelve lineal.	73
6.1.	Alfred James Lotka (1880-1949).	80
6.2.	Dinámica asociada al sistema (6.3): a) Comportamiento en vecindades de los equilibrios. b) Comportamiento global.	88
7.1.	Boris Pavlovich Belusov. Fotografía tomada de la página web: <a href="http://people.musc.edu/~aliev/belousov.jpg">http://people.musc.edu/~aliev/belousov.jpg</a>	93
7.2.	Las oscilaciones temporales de Belusov. Gráfica redibujada de [21].	94
7.3.	Patrones tipo “blanco” en la reacción de B-Z.	96
7.4.	Uno de los tantos patrones que aparecen en la reacción de B-Z: dos espirales rotando en sentido encontrado.	97
7.5.	Ondas en espiral en la reacción de B-Z. De arriba a abajo y de izquierda a derecha, respectivamente, con una, dos, tres y cuatro ramas.	98
7.6.	a) Modelo para la onda enrollada. b) La onda enrollada en la reacción de B-Z. Figuras tomadas de [24].	99
7.7.	Simulación numérica de una onda enrollada toroidal en la reacción B-Z. Aquí se muestra un corte transversal. Figura tomada de [24].	100
7.8.	Las ceroclinas del sistema (7.3).	106

7.9.	Posibles dinámicas en el sistema (7.3): a) Un atractor para $0 < f < 0,5$ . b) Un ciclo límite para $0,5 < f < 2,414$ . c) La excitabilidad para $2,414 < f < \infty$ . Figura redibujada de [21].	107
A.1.	Dilatación de una placa rectangular.	125
B.1.	Gráfica de una función: a) Creciente en el intervalo $I$ . b) Decreciente en el intervalo $I$ .	135
B.2.	El tipo de cambio de la función $z$ y el signo de la pendiente de la recta tangente: a) Si $z$ es creciente, $z'(x) > 0$ . b) Si $z$ es decreciente, $z'(x) < 0$ .	136
B.3.	Dos tipos de puntos críticos de una función: a) Cuando la función cambia de ser creciente a decreciente. b) Cuando cambia de decreciente a creciente.	137
C.1.	Gráfica de la presión en la ley de los gases ideales: a) Manteniendo el volumen fijo. b) Manteniendo constante la temperatura.	140
C.2.	Gráfica de $P = P(V, T)$ en la ley de los gases ideales. Véase la explicación en el texto.	141
C.3.	La “sábana hiperbólica” $P = P(V, T)$ , en la ley de los gases ideales. Curvas de nivel $P \equiv P_0$ : (a) sobre un dominio rectangular; (b) sobre un dominio circular.	142
C.4.	Gráfica de una función “suave” de $\mathbf{R}^2$ a $\mathbf{R}$ .	144
C.5.	Intersección de la gráfica de $z$ con un plano paralelo al $xz$ . Véase el texto.	144
C.6.	Intersección de la gráfica de $z$ con un plano paralelo al $yz$ .	145

# Presentación de la Serie

## “Matemática Aplicada y su Enseñanza”

*Maestro ¿y esto para qué sirve?...* Es la pregunta que muchas veces se oye en un salón de clase de Matemáticas. La Sociedad Matemática Mexicana a través de su Comité de Educación trata de colaborar a que la enseñanza de las matemáticas sea cada vez mejor, a que los que las estudian se convenzan de que el esfuerzo que tienen que realizar para aprenderlas no es solamente para pasar de año, sino que los procesos de pensamiento que enfrentan, las habilidades que adquieren y sobre todo la actitud que deben tener frente a los problemas es útil en su formación, en su desarrollo profesional, incluso en su vida cotidiana.

Por saber matemáticas entendemos participar del quehacer matemático; es decir, tener habilidad para resolver problemas, conjeturar, hacer demostraciones.

Gracias al apoyo del CONACYT, la Sociedad Matemática Mexicana (SMM) ha podido sostener el proyecto “Matemática Aplicada y su Enseñanza”, que ha colaborado y estamos seguros colaborará a que los profesores nos podamos enfrentar a ofrecer a nuestros estudiantes un producto, las matemáticas, más interesante, más lúdico, de más calidad. A que los alumnos puedan tener a la mano respuestas a la pregunta que hacemos al inicio de esta presentación.

Desde su inicio el proyecto se dividió en dos niveles: el nivel de Bachillerato y el nivel de Licenciatura.

Algunos de los trabajos que presentamos en estos volúmenes fueron hechos a petición expresa y con muchas horas de discusión sobre lo que debía de ser el resultado del proyecto, luego éstos pasaron a arbitraje. Posteriormente hicimos un primer concurso para convocar a la comunidad matemática del País a que colaborara con este proyecto, poniendo en la página de la Sociedad ejemplos de qué es lo que estábamos esperando. La respuesta de la comunidad ha sido excepcionalmente buena y para iniciar la serie ya contamos con material para seis volúmenes de Bachillerato y seis de Licenciatura.

Cada volumen de Bachillerato cuenta con algunos fascículos que tratan temas de matemáticas con aplicaciones, a veces a la matemática misma, y en ocasiones la forma de cómo se puede desarrollar este contenido en clase a manera de una propuesta didáctica.

Para el nivel Licenciatura se tiene la idea de mostrar aplicaciones que sean susceptibles de enseñar en los primeros semestres de una Licenciatura como Biología, alguna Ingeniería, Economía, Química, desde luego Matemáticas, etc.

Para su presentación hay dos tipos de clasificaciones, una por áreas de las matemáticas, así hay volúmenes para Cálculo, para Álgebra Lineal, para Geometría, otra por la aplicación; Matemáticas aplicadas a la ciencias de la vida y Matemáticas aplicadas a la negociación.

Sinceramente esperamos colaborar con maestros y alumnos en lograr un mejor y más profundo aprendizaje de las matemáticas.

“Provocar aprendizajes, es nuestra tarea en la enseñanza”.

Agradecemos a todos los que en algún momento han colaborado con este proyecto: escritores, árbitros, concursantes. Todo aquel que se ha enfrentado a la tarea de editar sabe que ésta es ardua. Ha sido importante la colaboración de María Teresa V. Martínez Palacios, Gricelda Cedillo Ramírez, Martha Cerrilla y Aranda, Alejandro Bravo Mojica, Graciela González Hita y Hernán González a ellos les damos las gracias. Por último queremos agradecer al CIMAT y a su director José Carlos Gómez Larrañaga por esta coedición con la SMM.

Afectuosamente,

Coordinadores del Proyecto “Matemática Aplicada y su Enseñanza” de la SMM.

Dr. Fernando Brambila Paz  
Departamento de Matemáticas,  
Facultad de Ciencias, UNAM.

Dr. Alejandro J. Díaz Barriga Casales  
Instituto de Matemáticas  
UNAM.

Septiembre de 2004.

# Presentación

## “Ciencias de la Vida”

Una de las características de la materia es su constante transformación, su permanente cambio. Descubrir en estos cambios los principios generales válidos en esa gran diversidad de transformaciones, ha sido uno de los problemas que ha atraído la atención de muchos científicos. El *principio de conservación de la materia*, es uno de aquellos e indica que, no obstante las distintas formas que tome la materia en su permanente cambio, ésta no se destruye, no desaparece... sólo se transforma y, por tanto, su cantidad total, aunque bajo formas distintas, se conserva.

Uno de los mecanismos a través de los cuales la materia se transforma, lo constituyen las reacciones químicas. Muchos de los procesos vitales y de hecho, la existencia de la vida misma, hubiera sido imposible sin la realización de muchas y complejas cadenas de reacciones químicas. Por ejemplo, la transformación de los alimentos tal cual los consumimos a proteínas aprovechables por el cuerpo humano, involucra reacciones químicas que se agrupan en el conjunto de procesos conocido como metabolismo. Las reacciones químicas que se desencadenan a partir de la recepción —en la parte verde de las plantas en el caso de muchos vegetales— de la luz proveniente del sol, hace posible la producción de oxígeno, vital para todos los organismos aeróbicos.

La existencia de reacciones cuya realización necesita “tiempos grandes”, mientras que otras se llevan a cabo con gran rapidez, nos lleva a averiguar los factores que influyen para que una reacción sea caracterizada como rápida, mientras que otras sean identificadas como lentas.

La *Ley de Acción de Masas*, válida bajo un conjunto de premisas, establece cómo ha de evaluarse la velocidad instantánea de una reacción química. Su formulación matemática se hace a través de herramientas matemáticas que, genéricamente, se llaman ecuaciones diferenciales; muy simples si las premisas son en extremo restrictivas, un poco más complicadas si las premisas se debilitan y en definitiva inmanejables, si la reacción es muy compleja así como si en la ley cinética que la describe, se incorporan muchos más factores.

En este volumen de la serie *Matemáticas para las ciencias de la vida*, nos restringimos a las premisas más parsimoniosas que es posible considerar. Los modelos resultantes son relativamente simples, razón por la cual se dejan estudiar con alguna facilidad y extraer de su análisis información valiosa desde el punto de vista interpretativo.

Los problemas de cinética química a través de los que introducimos la matemática apropiada, van desde reacciones monomoleculares hasta un conjunto de reacciones que son, en sí mismas, un mecanismo para la reacción originalmente planteada y estudiada por el bioquímico soviético Boris Pavlovich Belusov, a propósito de intentar crear una caricatura inorgánica del metabolismo. Al transitar entre estos dos extremos, en el camino nos encontramos con reacciones que, al realizarse bajo la influencia de otros factores (la presencia de catalizadores o los cambios en la temperatura), que en un principio no consideramos y ser en sí mismas más complejas (reversibles, paralelas, acopladas, etc.), las leyes cinéticas que las rigen incrementan su dificultad... y también su riqueza.

Por el lado matemático, el análisis de las diversas leyes cinéticas nos permite llevar al lector, tan de la mano como es posible, a hacer un estudio de herramientas y conceptos propios de: cálculo diferencial e integral en una variable, cálculo diferencial en dos variables, teoría cualitativa de ecuaciones diferenciales y —sólo como herramienta— regresión lineal. Este libro, como lo sugiere su título, no ha de entenderse como un texto de cualquiera de estas asignaturas. Se trata, eso sí, de un libro en el que presentamos temas de cinética química desde la perspectiva de la matemática. En él enfatizamos, tanto la interpretación de las variables y de los parámetros que aparecen en las leyes cinéticas y destacamos la importancia que tiene la determinación de aquellos a partir de una colección de datos experimentales.

A fin de hacer la lectura más ágil, hemos reservado para los apéndices la presentación de las herramientas matemáticas que se usan en este libro. Sin embargo, debemos advertir a nuestro lector que la comprensión de los temas que aquí se exponen será mejor si en todos los sitios en donde se remite a los apéndices se hace caso a esa sugerencia.

Faustino Sánchez Garduño