



Universidad de San Carlos de Guatemala  
Facultad de Ingeniería  
Escuela de Ingeniería Química

**EVALUACIÓN DE LA CINÉTICA DE DESPOLIMERIZACIÓN POR HIDRÓLISIS BÁSICA DEL  
TEREFTALATO DE POLIETILENO (PET) CON HIDRÓXIDO DE POTASIO, PARA  
DIFERENTES CONDICIONES DE TEMPERATURA Y TAMAÑO DE PARTÍCULA, A NIVEL  
LABORATORIO**

**Walther Rodolfo Solís Portillo**

Asesorado por el Ing. William Eduardo Fagiani Cruz

Guatemala, octubre de 2018

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA



FACULTAD DE INGENIERÍA

**EVALUACIÓN DE LA CINÉTICA DE DESPOLIMERIZACIÓN POR HIDRÓLISIS BÁSICA DEL  
TEREFTALATO DE POLIETILENO (PET) CON HIDRÓXIDO DE POTASIO, PARA  
DIFERENTES CONDICIONES DE TEMPERATURA Y TAMAÑO DE PARTÍCULA, A NIVEL  
LABORATORIO**

TRABAJO DE GRADUACIÓN

PRESENTADO A LA JUNTA DIRECTIVA DE LA  
FACULTAD DE INGENIERÍA  
POR

**WALTHER RODOLFO SOLÍS PORTILLO**

ASESORADO POR EL ING. WILLIAM EDUARDO FAGIANI CRUZ

AL CONFERÍRSELE EL TÍTULO DE

**INGENIERO QUÍMICO**

GUATEMALA, OCTUBRE DE 2018

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA  
FACULTAD DE INGENIERÍA



**NÓMINA DE JUNTA DIRECTIVA**

DECANO	Ing. Pedro Antonio Aguilar Polanco
VOCAL I	Ing. Angel Roberto Sic García
VOCAL II	Ing. Pablo Christian de León Rodríguez
VOCAL III	Ing. José Milton de León Bran
VOCAL IV	Br. Oscar Humberto Galicia Nuñez
VOCAL V	Br. Carlos Enrique Gómez Donis
SECRETARIA	Inga. Lesbia Magalí Herrera López

**TRIBUNAL QUE PRACTICÓ EL EXAMEN GENERAL PRIVADO**

DECANO	Ing. Pedro Antonio Aguilar Polanco
EXAMINADOR	Ing. Jorge Emilio Godínez Lemus
EXAMINADOR	Ing. Mario José Mérida Meré
EXAMINADOR	Ing. Jorge Mario Estrada Asturias
SECRETARIA	Inga. Lesbia Magalí Herrera López

## **HONORABLE TRIBUNAL EXAMINADOR**

En cumplimiento con los preceptos que establece la ley de la Universidad de San Carlos de Guatemala, presento a su consideración mi trabajo de graduación titulado:

### **EVALUACIÓN DE LA CINÉTICA DE DESPOLIMERIZACIÓN POR HIDRÓLISIS BÁSICA DEL TEREFTALATO DE POLIETILENO (PET) CON HIDRÓXIDO DE POTASIO, PARA DIFERENTES CONDICIONES DE TEMPERATURA Y TAMAÑO DE PARTÍCULA, A NIVEL LABORATORIO**

Tema que me fuera asignado por la Dirección de la Escuela de Ingeniería Química, con fecha 18 de abril de 2017.

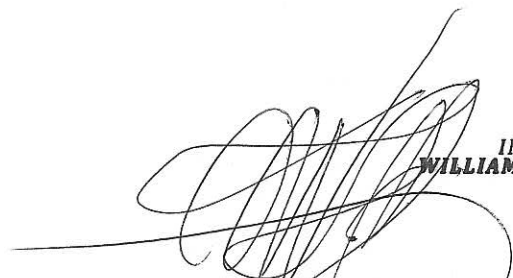
**Walther Rodolfo Solís Portillo**

Guatemala, 10 de julio de 2018

Ing. Carlos Salvador Wong Davi  
Director de la escuela de ingeniería Química  
Universidad de San Carlos de Guatemala  
Presente,

De la manera más atenta me dirijo a usted para hacer de su conocimiento que yo William Eduardo Fagiani Cruz, colegiado activo 1734 he aprobado el informe final del trabajo de graduación **"Evaluación de la cinética de despolimerización por hidrólisis básica del tereftalato de polietileno (PET) con hidróxido de potasio, para diferentes condiciones de temperatura y tamaño de partícula, a nivel laboratorio"** presentado por el estudiante Walther Rodolfo Solís Portillo identificado con CUI No. 2713 50679 0101 y registro académico 201314846, como proyecto de graduación. Sin más que agregar, me suscribo de usted.

Atentamente,



**INGENIERO QUÍMICO  
WILLIAM EDUARDO FAGIANI CRUZ  
COL. 1734**

William Eduardo Fagiani Cruz

Ingeniero Químico

Colegiado Activo 1734



Guatemala, 29 de agosto de 2018.  
Ref. EIQ.TG-IF.036.2018.

Ingeniero  
Carlos Salvador Wong Davi  
DIRECTOR  
Escuela de Ingeniería Química  
Facultad de Ingeniería

Estimado Ingeniero Wong:

Como consta en el registro de evaluación del informe final EIQ-PRO-REG-007 correlativo **074-2016** le informo que reunidos los Miembros de la Terna nombrada por la Escuela de Ingeniería Química, se practicó la revisión del:

**INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADUACIÓN  
-Modalidad Seminario de Investigación-**

Solicitado por el estudiante universitario: **Walther Rodolfo Solís Portillo**.  
Identificado con número de carné: **2713 50679 0101**.  
Identificado con registro académico: **2013-14846**.  
Previo a optar al título de **INGENIERO QUÍMICO**.

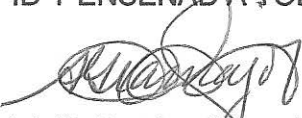
Siguiendo los procedimientos de revisión interna de la Escuela de Ingeniería Química, los Miembros de la Terna han procedido a **APROBARLO** con el siguiente título:

**EVALUACIÓN DE LA CINÉTICA DE DESPOLIMERIZACIÓN POR HIDRÓLISIS BÁSICA DEL TEREFTALATO DE POLIETILENO (PET) CON HIDRÓXIDO DE POTASIO, PARA DIFERENTES CONDICIONES DE TEMPERATURA Y TAMAÑO DE PARTÍCULA, A NIVEL LABORATORIO**

El Trabajo de Graduación ha sido asesorado por el Ingeniero Químico: **William Eduardo Fagiani Cruz**.

Habiendo encontrado el referido informe final del trabajo de graduación **SATISFACTORIO**, se autoriza al estudiante, proceder con los trámites requeridos de acuerdo a las normas y procedimientos establecidos por la Facultad para su autorización e impresión.

"ID Y ENSEÑAD A TODOS"

  
Ing. Adolfo Narciso Gramajo Antonio  
COORDINADOR DE TERNA  
Tribunal de Revisión  
Trabajo de Graduación



C.c.: archivo



Ref.EIQ.TG.038.2018

El Director de la Escuela de Ingeniería Química de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer el dictamen del Asesor y de los Miembros del Tribunal nombrado por la Escuela de Ingeniería Química para revisar el Informe del Trabajo de Graduación del (la) estudiante, **WALTHER RODOLFO SOLÍS PORTILLO** titulado: **"EVALUACIÓN DE LA CINÉTICA DE DESPOLIMERIZACIÓN POR HIDRÓLISIS BÁSICA DEL TEREFTALATO DE POLIETILENO (PET) CON HIDRÓXIDO DE POTASIO, PARA DIFERENTES CONDICIONES DE TEMPERATURA Y TAMAÑO DE PARTÍCULA, A NIVEL LABORATORIO "**. Procede a la autorización del mismo, ya que reúne el rigor, la secuencia, la pertinencia y la coherencia metodológica requerida.

*"Id y Enseñad a Todos"*

Ing. Carlos Salvador Wong Davi  
Director  
Escuela de Ingeniería Química

Guatemala, octubre de 2018  
FACULTAD DE INGENIERIA USAC  
ESCUELA DE INGENIERIA QUIMICA  
DIRECTOR

Cc: Archivo  
CSWD/ale

Universidad de San Carlos  
De Guatemala




Facultad de Ingeniería  
Decanato

\*Ref. DTG.415.2018

El Decano de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer la aprobación por parte del Director de la Escuela de Ingeniería Química del trabajo de graduación titulado: **“EVALUACIÓN DE LA CINÉTICA DE DESPOLIMERIZACIÓN POR HIDRÓLISIS BÁSICA DEL TERÉFTALATO DE POLIETILENO (PET) CON HIDRÓXIDO DE POTASIO, PARA DIFERENTES CONDICIONES DE TEMPERATURA Y TAMAÑO DE PARTÍCULA, A NIVEL LABORATORIO”**, presentado por el estudiante universitario: **Walther Rodolfo Solís Portillo** y después de haber culminado las revisiones previas bajo la responsabilidad de las instancias correspondientes, se autoriza la impresión del mismo.

IMPRÍMASE.

  
Ing. Pedro Antonio Aguilar Polanco  
Decano



Guatemala, Octubre de 2018

/echm



## **ACTO QUE DEDICO A:**

<b>Dios</b>	Quien es el ser supremo que nos permitió existir y a quien agradezco por brindarme sabiduría y fortaleza para cumplir mis metas.
<b>Mis padres</b>	Isabel Portillo y Jorge Solís, por haberme brindado sus enseñanzas, apoyo y amor durante mi vida.
<b>Mi familia</b>	Quienes han formado parte de mi vida y que han enriquecido mi vida con su compañía y aprecio.
<b>Mis amigos</b>	Quienes me han acompañado durante mi vida, con los que he compartido muchas experiencias agradables e hicieron más amena mi estancia en la universidad.
<b>Catedráticos de la Facultad de Ingeniería</b>	Por compartir sus conocimientos y demostrar su pasión por la enseñanza para formar los profesionales del mañana.

## **AGRADECIMIENTOS A:**

<b>Universidad de San Carlos de Guatemala</b>	Por ser mi casa de estudio y formarme como profesional.
<b>Facultad de Ingeniería</b>	Por ser la facultad que me formó en mi pasión de la ciencia e ingeniería.
<b>Mis amigos</b>	Por brindarme su amistad, consejos y apoyo incondicional.
<b>Mis amigos del grupo de LOPU</b>	Eduardo de Paz, Yoselin Raxón y Emilio Galindo, por brindarme su compañía y amistad durante mi carrera universitaria.
<b>Ing. William Fagiani</b>	Por su asesoría en mi trabajo de graduación y ser un catedrático excepcional de la Escuela de Ingeniería Química.
<b>Ing. Adolfo Gramajo</b>	Por ser el revisor de mi trabajo de graduación.
<b>Departamento de Física y Matemática</b>	Por darme la oportunidad de trabajar en la Facultad de Ingeniería.

## ÍNDICE GENERAL

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES.....	VII
LISTA DE SÍMBOLOS.....	XI
GLOSARIO.....	XV
RESUMEN.....	XVII
OBJETIVOS.....	XIX
HIPÓTESIS.....	XXI
INTRODUCCIÓN.....	XXV
1. ANTECEDENTES.....	1
2. MARCO TEÓRICO.....	5
2.1. Reacción química.....	5
2.2. Cinética de reacción.....	6
2.2.1. Teoría de colisiones.....	6
2.2.1.1. Velocidad de reacción.....	7
2.2.2. Mecanismo de reacción.....	8
2.2.3. Ley de velocidad.....	9
2.2.3.1. Constante de velocidad de reacción.....	9
2.2.3.2. Energía de activación.....	11
2.2.3.3. Orden de reacción.....	11
2.2.3.4. Ley de velocidad para reacciones fluido – partícula sólida.....	13
2.3. Polímeros.....	16
2.3.1. Ésteres.....	18
2.3.1.1. Hidrólisis de ésteres.....	19

	2.3.1.1.1.	Hidrólisis ácida .....	19
	2.3.1.1.2.	Hidrólisis alcalina .....	20
2.4.		Conductividad electrolítica .....	22
	2.4.1.1.	Electrolitos débiles .....	23
	2.4.1.2.	Electrolitos fuertes .....	24
2.5.		Espectroscopia molecular .....	26
	2.5.1.	Espectroscopia por rayos infrarrojos .....	26
3.		DISEÑO METODOLÓGICO.....	29
3.1.		Variables .....	29
3.2.		Delimitación del campo de estudio.....	30
	3.2.1.	Fundamento de conocimiento .....	30
	3.2.2.	Proceso .....	30
	3.2.3.	Localización.....	30
	3.2.4.	Condiciones ambientales .....	30
3.3.		Recursos humanos disponibles .....	31
3.4.		Recursos materiales disponibles.....	31
3.5.		Técnica cualitativa y cuantitativa .....	33
3.6.		Recolección y ordenamiento de la información.....	34
	3.6.1.	Curva de calibración de concentración de hidróxido de potasio – conductividad eléctrica .....	35
	3.6.2.	Monitoreo de la conductividad eléctrica durante la reacción .....	36
	3.6.3.	Determinación de la fracción de conversión del tereftalato de polietileno .....	37
	3.6.4.	Caracterización de los productos de la reacción .....	38
	3.6.5.	Calibración del conductímetro .....	38
3.7.		Tabulación, ordenamiento y procesamiento de la información.....	38

3.7.1.	Tabulación de datos experimentales obtenidos.....	39
3.7.2.	Cálculo de la concentración de hidróxido de potasio a partir de la conductividad eléctrica .....	39
3.7.3.	Cálculo de la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno mediante gravimetría .....	40
3.7.4.	Cálculo de la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno mediante conductividad eléctrica .....	40
3.7.5.	Calculo de la ley de velocidad .....	41
3.7.6.	Determinación de las energías de activación .....	43
3.7.7.	Desviación de la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno calculada.....	44
3.7.8.	Propagación de errores .....	44
3.8.	Análisis estadístico .....	45
3.8.1.	Análisis de regresión lineal .....	45
3.8.1.1.	Residuos.....	45
3.8.1.2.	Significancia de los estadísticos de la regresión .....	46
3.8.2.	Análisis de varianza.....	46
3.8.2.1.	Factores y bloques .....	47
3.8.2.2.	Análisis de potencia.....	47
3.9.	Plan de análisis de resultados .....	49
3.9.1.	Métodos y modelos de los datos según tipo de variables .....	49
3.9.2.	Programas utilizados para el análisis de datos.....	50
4.	RESULTADOS .....	51
4.1.	Efecto de la temperatura sobre la cinética de despolimerización del tereftalato de polietileno .....	52

4.2.	Efecto del tamaño de partícula sobre la cinética de despolimerización del tereftalato de polietileno .....	53
4.3.	Modelo de la ley de velocidad de la despolimerización por hidrólisis básica del tereftalato de polietileno con hidróxido de potasio.....	54
4.4.	Desviación de la conversión fraccionaria calculada mediante gravimetría y conductimetría .....	55
4.5.	Caracterización de los productos de la degradación por hidrólisis básica del tereftalato de polietileno con hidróxido de potasio.....	56
4.6.	Energía libre, entalpia y entropía de activación de la reacción de despolimerización mediante hidrólisis básica del tereftalato de polietileno por medio de hidróxido de potasio.....	57
4.7.	Análisis de varianza .....	58
5.	INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS .....	61
5.1.	Efecto de la temperatura sobre la cinética de despolimerización del tereftalato de polietileno .....	63
5.2.	Efecto del tamaño de partícula sobre la cinética de despolimerización del tereftalato de polietileno .....	63
5.3.	ley de velocidad de la despolimerización por hidrólisis básica del tereftalato de polietileno con hidróxido de potasio ..	64
5.4.	Desviación de la conversión fraccionaria calculada mediante gravimetría y conductimetría .....	66
5.5.	Caracterización de los productos de la degradación por hidrólisis básica del tereftalato de polietileno con hidróxido de potasio.....	66

5.6.	Propiedades de activación de la reacción de despolimerización mediante hidrólisis básica del tereftalato de polietileno por medio de hidróxido de potasio.....	67
5.7.	Análisis de varianza.....	68
CONCLUSIONES .....		71
RECOMENDACIONES .....		73
BIBLIOGRAFÍA.....		75
APÉNDICES .....		79
ANEXOS .....		103





# ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

## FIGURAS

1.	Comportamiento esperado de la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización en función del tamaño de partícula .....	XXII
2.	Comportamiento esperado de la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización en función de la temperatura.....	XXII
3.	Niveles de energía de los estados inicial, activado y final (reacción endotérmica) .....	11
4.	Diferentes tipos de comportamiento de partículas reactivas sólidas....	14
5.	Algunos polímeros lineales, sus monómeros y sus unidades repetitivas.....	16
6.	Estructura de Lewis del tereftalato de polietileno .....	18
7.	Estructura de Lewis de un éster.....	19
8.	Hidrólisis ácida de un éster .....	20
9.	Hidrólisis básica de un éster .....	20
10.	Mecanismo de reacción de la hidrólisis básica de un éster.....	21
11.	Hidrólisis básica del tereftalato de polietileno.....	22
12.	Variación de la conductividad molar en función de $c$ para algunas disoluciones acuosas de electrolitos a 25 °C .....	24
13.	Montaje del equipo.....	37
14.	Curva de calibración, conductividad eléctrica en función de la concentración de hidróxido de potasio.....	51

15.	Conversión fraccionaria en función de la temperatura para la despolimerización del tereftalato de polietileno por hidrólisis básica con hidróxido de potasio luego de una hora de reacción.....	52
16.	Conversión fraccionaria en función del tamaño de partícula para la despolimerización del tereftalato de polietileno por hidrólisis básica con hidróxido de potasio luego de una hora de reacción.....	53
17.	Desviación de la conversión fraccionaria de tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización por hidrólisis básica con hidróxido de potasio calculada mediante gravimetría y conductimetría .....	55
18.	Espectro infrarrojo del compuesto extraído de la reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno mediante hidrólisis básica con hidróxido de potasio.....	56
19.	Linealización de la ecuación de Eyring-Polanyi .....	57
20.	Mecanismo de reacción de despolimerización .....	61

## TABLAS

I.	Comportamiento para la reacción hipotética $A \rightarrow \text{Productos}$ .....	12
II.	Conductividades iónicas molares en agua a 25°C (a dilución infinita ...	25
III.	Bandas características de grupos funcionales para microscopia infrarroja.....	27
IV.	Bandas características del espectro infrarrojo del ácido tereftálico .....	28
V.	Variables de evaluación experimentales.....	29
VI.	Valor o rango aplicado a cada variable.....	29
VII.	Equipo y cristalería para montaje de reactor .....	31
VIII.	Equipo y cristalería para la preparación de los reactivos de la reacción química.....	32

IX.	Equipo y cristalería para la separación del tereftalato de polietileno sin reaccionar de la solución y precipitación del ácido tereftálico .....	33
X.	Reactivos necesarios .....	33
XI.	Nomenclatura de las corridas experimentales .....	34
XII.	Plan de ejecución de ensayos experimentales .....	35
XIII.	Bloques para análisis de varianza.....	47
XIV.	Valores de $z_{1-\alpha}$ y $z_{1-\beta}$ más frecuentes utilizados.....	48
XV.	Modelos de la ley de velocidad de la reacción de despolimerización de tereftalato de polietileno mediante hidrólisis básica con hidróxido de potasio.....	54
XVI.	Análisis de varianza del efecto del tamaño de partícula del tereftalato de polietileno sobre la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización mediante hidrólisis básica. ....	58
XVII.	Análisis de varianza del efecto de la temperatura a la que se lleva a cabo la reacción sobre la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización mediante hidrólisis básica... ..	58
XVIII.	Efecto de la temperatura sobre la constante cinética de la reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno mediante hidrólisis básica.....	59
XIX.	Efecto de la temperatura sobre el orden de reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno mediante hidrólisis básica.....	59



## LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Significado
$A$	Absorbancia
$A_T$	Área transversal (m <sup>2</sup> )
$C^{KOH}$	Concentración de hidróxido de potasio
$C_0^{KOH}$	Concentración inicial de hidróxido de potasio
$d\%$	Desviación de datos
$E_a$	Energía de activación (kJ/kg)
$f_c$	Factor de colisiones
$G$	Conductancia (S)
$h$	Constante de Planck $6,6260 \cdot 10^{-34}$ J s
$k_B$	Constante de Boltzmann $1,3806 \cdot 10^{-23}$ J/K
$k_S$	Constante cinética con base en el área superficial
$k_V$	Constante cinética con base en el volumen
$k_i$	Constante cinética con base en la especie $i$
$l$	Longitud (m)
$m$	Masa (g)
$m_C^{PET}$	Masa consumida de tereftalato de polietileno
$m^{PET}$	Masa de tereftalato de polietileno
$m^{PET+PF}$	Masa de tereftalato de polietileno con papel filtro
$m^{PF}$	Masa del papel filtro
$N_B$	Moles de la especie $B$
$N_C^{KOH}$	Moles consumidos de hidróxido de potasio
$N_C^{PET}$	Moles consumidos de tereftalato de polietileno

$P$	Presión (atm)
$R$	Coefficiente de correlación de Pearson
$R^2$	Coefficiente de determinación
$r_i$	Velocidad de reacción por unidad de volumen
$r_i'$	Velocidad de reacción por unidad de masa
$r_i''$	Velocidad de reacción por unidad de superficie
$r_t$	Radio de la partícula en función del tiempo
$S$	Área superficial (m <sup>2</sup> )
$S_m$	Desviación estándar muestral
$T$	Temperatura
$t$	Tiempo
$V$	Volumen (ml)
$v_{rms}$	Velocidad cuadrática media
$\bar{X}$	Media aritmética de la variable $X$
$X_B$	Fracción de conversión de la especie $B$
$X^{PET}$	Fracción de conversión de tereftalato de polietileno
$X_c^{PET}$	Fracción de conversión calculada por conductimetría
$X_g^{PET}$	Fracción de conversión calculada por gravimetría
$y$	$\ln\left(-\frac{1}{4\pi R^2(1-X^{PET})^{\frac{2}{3}}}\ast\frac{dN^{PET}}{dt}\right)$
$1 - \beta$	Potencia estadística
$\%T$	Porcentaje de transmitancia
$\Lambda^0$	Conductividad molar a dilución infinita
$\kappa_{sol}$	Conductividad eléctrica de la solución (mS/cm)
$\lambda_+^0$	Conductividad iónica del catión
$\lambda_-^0$	Conductividad iónica del anión
$\hat{\sigma}$	Error típico
$\Delta G^\ddagger$	Energía de Gibbs de activación (kJ/mol)

$\Delta H^\ddagger$	Entalpia de activación (kJ/mol)
$\Delta S^\ddagger$	Entropía de activación (kJ/mol K)
$\emptyset$	Tamaño de partícula
$\Lambda$	Conductividad molar (mS/cm mol)
$\alpha$	Orden de reacción
$\gamma$	Coefficiente de actividad
$\delta E$	Incerteza de la especie e
$\kappa$	Conductividad eléctrica (mS/cm)





## GLOSARIO

<b>Conductimetría</b>	Método analítico que se basa en la conducción eléctrica de la solución para cuantificar la molaridad de la disolución.
<b>Despolimerización</b>	Reacción química en la cual un polímero se descompone en su respectivo monómero.
<b>Espectroscopia</b>	Estudio de la interacción de la radiación electromagnética y la materia, con absorción o emisión de energía radiante.
<b>Gravimetría</b>	Método analítico cuantitativo para determinar la cantidad de una sustancia midiendo su peso.
<b>Hidrólisis</b>	Descomposición de una sustancia orgánica por acción del agua.
<b>Ley de velocidad</b>	Ecuación matemática mediante la cual se expresa la velocidad de una reacción química en función de la concentración de los reactivos.
<b>Mecanismo de reacción</b>	Conjunto de estados o subprocesos por los cuales pasa una reacción química para llevarse a cabo.

<b>Polímero</b>	Macromoléculas generalmente orgánicas, formadas por monómeros unidos mediante enlaces covalentes.
<b>Reacción heterogénea</b>	Reacción en la cual están involucradas dos o más fases que interactúan entre sí.
<b>Reacción química</b>	Proceso termodinámico en el cual una o más sustancias se transforman en otra sustancia por medio químico.
<b>Regresión lineal</b>	Proceso matemático por el cual se realiza una aproximación lineal, a una función, en un punto dado.
<b>Termoplástico</b>	Material que se ablanda por la acción del calor y se endurece al enfriarse de forma reversible.
<b>Velocidad de reacción</b>	Cantidad de sustancia que se transforma en una determina reacción por unidad de tiempo y volumen.

## RESUMEN

En la investigación experimental se realizó la evaluación de la cinética de despolimerización del tereftalato de polietileno (PET) por hidrólisis básica con hidróxido de potasio para formar tereftalato de potasio y etilenglicol a diferentes condiciones de temperatura y tamaño de partícula.

Se evaluó la reacción mezclando 250 ml de hidróxido de potasio 2,0 M a 15 gramos de tereftalato de polietileno durante una hora. En este proceso se monitoreó la concentración de hidróxido de potasio con conductimetría cada 5 minutos y se determinó la conversión del tereftalato de polietileno mediante gravimetría. Se realizó este experimento con tres variaciones de temperatura y tres variaciones de tamaño de partícula para un total de 9 tratamientos cada uno con dos repeticiones dando un total de 18 corridas.

A partir de los datos experimentales gravimétricos se cuantificó el efecto de la temperatura y el tamaño de partícula en la conversión de tereftalato de polietileno. Con los datos obtenidos por conductimetría se determinó la ley de velocidad de la reacción y, mediante la ecuación de Eyring-Polanyi, se estimó la energía de Gibbs, entropía y entalpia de activación de la reacción estudiada.

Debido a que la reacción se estudió mediante dos metodologías independientes se evaluó la desviación de los resultados obtenidos entre los dos métodos, para verificar su congruencia.

Para caracterizar los productos de la reacción, se agregó ácido clorhídrico a la solución obtenida a fin de precipitar el ácido tereftálico producido y mediante espectroscopia infrarroja verificar la formación del producto deseado.

La metodología experimental se realizó en un ambiente con temperatura promedio entre 18 °C a 22 °C, humedad relativa media entre 59 % a 76 % y una presión atmosférica de 0,840 atm.

## **OBJETIVOS**

### **General**

Evaluar la cinética de la degradación por hidrólisis básica del tereftalato de polietileno con hidróxido de potasio, a tres temperaturas y tres tamaños de partícula, a nivel laboratorio.

### **Específicos**

1. Cuantificar el efecto del tamaño de partícula del tereftalato de polietileno en su cinética de despolimerización mediante hidrólisis básica por medio de gravimetría.
2. Cuantificar el efecto de la temperatura en la cinética de despolimerización del tereftalato de polietileno mediante hidrólisis básica por medio de gravimetría.
3. Estimar la ley de velocidad de la despolimerización por hidrólisis básica del tereftalato de polietileno con hidróxido de potasio mediante conductividad eléctrica.
4. Verificar que los resultados obtenidos mediante gravimetría y conductividad eléctrica son congruentes entre sí.

5. Caracterizar los productos de la degradación por hidrólisis básica del tereftalato de polietileno con hidróxido de potasio mediante espectroscopia infrarroja.
  
6. Estimar la energía libre, entalpía y entropía de activación de la reacción de despolimerización por hidrólisis básica del tereftalato de polietileno.

## HIPÓTESIS

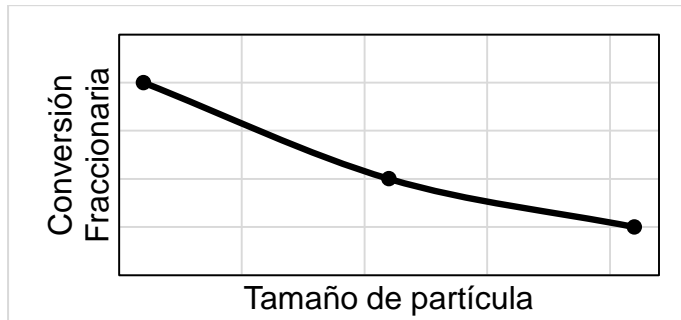
La cinética de la reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno por hidrólisis básica con hidróxido de potasio es una reacción heterogénea donde este plástico se transforma en tereftalato de potasio, un compuesto soluble, que migra de la fase sólida a la fase acuosa. Por lo que puede modelarse la cinética de despolimerización de este plástico con el modelo teórico de núcleo que se encoge sin reaccionar.

La despolimerización del tereftalato de polietileno, mediante la reacción mencionada, consume los iones libres de hidróxido para promover la ruptura de la cadena del polímero; esto genera un compuesto soluble que reduce la conductividad eléctrica de la solución y el tamaño de partícula del plástico, por lo que es posible monitorear la reacción mediante conductividad eléctrica y gravimetría.

### **Hipótesis conceptual**

a. Se predice que a menor tamaño de partícula mayor será la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno en la reacción de despolimerización mediante hidrólisis básica, debido a que al reducir el tamaño de las partículas se incrementa el área superficial por unidad de masa del tereftalato de polietileno, con mayor área superficial se incrementan las colisiones efectivas que promueven la conversión del tereftalato de polietileno a ácido tereftálico.

Figura 1. **Comportamiento esperado de la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización en función del tamaño de partícula**

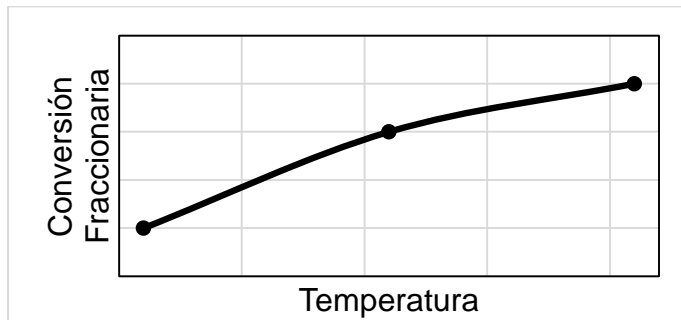


$$X^{PET} \propto \frac{1}{\phi} \begin{cases} X^{PET} \propto r'_i \\ r'_i \propto \frac{A_s}{m} \\ \frac{A_s}{m} \propto \frac{1}{\phi} \end{cases}$$

Fuente: elaboración propia.

b. Se predice que a mayor temperatura mayor será la conversión fraccionaria del PET en la reacción de despolimerización mediante hidrólisis básica, debido a que el aumento de la temperatura incrementa las colisiones efectivas que inicia la reacción de despolimerización.

Figura 2. **Comportamiento esperado de la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización en función de la temperatura**



$$X^{PET} \propto \sqrt{T} \begin{cases} X^{PET} \propto f_c \\ f_c \propto v_{rms} \\ v_{rms} \propto \sqrt{T} \end{cases}$$

Fuente: elaboración propia.



## Hipótesis estadística

- a. Efecto del tamaño de partícula del tereftalato de polietileno sobre la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización mediante hidrólisis básica.

Hipótesis nula ( $H_0$ ): El tamaño de partícula no afecta significativamente a la conversión fraccionaria.

$$X_{\emptyset 1} = X_{\emptyset 2} = X_{\emptyset 3}$$

Hipótesis alterna ( $H_1$ ): El tamaño de partícula del tereftalato de polietileno afecta significativamente a la conversión fraccionaria.

$$X_{\emptyset 1} \neq X_{\emptyset 2} \neq X_{\emptyset 3} \text{ (Al menos una diferente)}$$

- b. Efecto de la temperatura a la que se lleva a cabo la reacción sobre la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización mediante hidrólisis básica.

Hipótesis nula ( $H_0$ ): La temperatura a la que se lleva a cabo la reacción no afecta significativamente a la conversión.

$$X_{T1} = X_{T2} = X_{T3}$$

Hipótesis alternativa ( $H_1$ ): La temperatura a la que se lleva a cabo la reacción afecta significativamente a la conversión.

$$X_{T1} \neq X_{T2} \neq X_{T3} \text{ (Al menos una diferente)}$$

- c. Efecto de la temperatura sobre la constante cinética de la reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno mediante hidrólisis básica.

Hipótesis nula ( $H_0$ ): La temperatura no afecta significativamente a la constante cinética de la reacción.

$$k_{T1} = k_{T2} = k_{T3}$$

Hipótesis alterna ( $H_1$ ): La temperatura afecta significativamente a la constante cinética de la reacción.

$$k_{T1} \neq k_{T2} \neq k_{T3} \text{ (Al menos una diferente)}$$

- d. Efecto de la temperatura sobre el orden de reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno mediante hidrólisis básica.

Hipótesis nula ( $H_0$ ): La temperatura no afecta significativamente al orden de reacción.

$$\alpha_{T1} = \alpha_{T2} = \alpha_{T3}$$

Hipótesis alterna ( $H_1$ ): La temperatura afecta significativamente al orden de reacción.

$$\alpha_{T1} \neq \alpha_{T2} \neq \alpha_{T3} \text{ (Al menos una diferente)}$$

## INTRODUCCIÓN

Las reacciones químicas son un aspecto fundamental en la carrera de Ingeniería Química ya que en la industria muchos procesos dependen de la transformación química de la materia prima.

El estudio de la cinética química es primordial para controlar y optimizar los procesos que dependan de alguna reacción química debido a que proporciona el fundamento para predecir el comportamiento al variar las condiciones de reacción.

El tereftalato de polietileno es un termoplástico ampliamente utilizado en bebidas embotelladas debido a su transparencia y alta resistencia. Actualmente, se ha incrementado el interés por la reutilización efectiva de los desechos del tereftalato de polietileno para preservar el medio ambiente y las fuentes de abastecimiento de las materias primas para la producción de polímeros sintéticos.

El tereftalato de polietileno se puede reciclar de forma mecánica, para que los desechos pueden convertirse en artículos moldeados o extruidos, después de un proceso de molido, aunque los productos obtenidos de esta manera tienen propiedades de desempeño inferiores a aquellas que presentan los materiales vírgenes. El tereftalato de polietileno no se descompone fácilmente en la naturaleza, pero puede ser despolimerizado químicamente para recuperar la materia prima. Hasta el momento se han investigado diferentes procesos de despolimerización química del tereftalato de polietileno como lo son la hidrólisis básica o ácida, la alcoholólisis y la glicólisis.

Es posible despolimerizar el tereftalato de polietileno mediante hidrólisis básica debido a que esta macromolécula cuenta con ésteres en su estructura los cuales, en presencia de una base como el hidróxido de potasio, desencadena una reacción de adición-eliminación que rompe la cadena de esta macromolécula.

## 1. ANTECEDENTES

En varios países se han desarrollado investigaciones relacionadas con la degradación de polímeros mediante diversos métodos, debido a su importancia en el reciclaje de estos materiales.

En Colombia, los investigadores Alejandro Vásquez, Elbert Contreras, Andrés Sánchez, John Muñoz, Alejandro Hoyos y Carmiña Gartner realizaron el estudio "Degradación hidrolítica del polietilen-tereftalato (PET)" el cual se publicó en el 2014. En él, se degradó el PET de botella, fragmentado en hidróxido de sodio etanólico 2 M durante dos horas. Alcanzó un porcentaje de degradación entre 84 y 90 %. Este trabajo se utilizó de referencia para el desarrollo de la metodología experimental, en especial para la caracterización de los productos de la reacción mediante espectroscopia infrarroja.

En México, los investigadores Juan Herrera y Anayansi Monje publicaron el estudio "Despolimerización de botellas de poli(tereftalato de etileno) (PET) post-consumo mediante glicólisis. Efecto del catalizador y del tipo de glicol" en julio del 2012. En el trabajo se analiza la despolimerización del PET para producir principalmente bis-2-hidroxietiltereftalato, BHET, mediante una glicólisis catalizada, llevada a cabo con un exceso de glicol y en presencia de diferentes catalizadores, como acetatos de cinc y sodio. Las reacciones de despolimerización se realizaron utilizando diferentes glicoles, como propilenglicol, dietilenglicol y etilenglicol. En este trabajo se concluye que la reacción de glicólisis catalizada es eficiente y adecuada para el reciclado químico del PET post-consumo, la reacción catalizada tiene un rendimiento

cercano al 80 % de bis-2-hidroxietiltereftalato puro en 2,5 horas, para rendimientos similares sin catálisis son necesarias alrededor de 10 horas.

En Argentina, A. E. Grimm, P. R. Bonelli y A. L. Cukierman publicaron el estudio “Degradación térmica de mezclas de residuos plásticos y lignocelulosicos: Caracterización cinética” en 2001. En el trabajo se analiza la degradación térmica de residuos de botellas de PET, de aserrín de álamo y de mezclas de estos de distinta composición, mediante análisis termogravimétrico no isotérmico en el rango de temperatura desde 25 a 900 °C. Los resultados obtenidos en el trabajo sugieren que la degradación térmica del residuo plástico se favorece en presencia del aserrín.

Julián Barrera, John Rodríguez, Jairo Perilla y Néstor Algecira, investigadores colombianos, plantearon el “Estudio de la degradación térmica de poli(alcohol vinílico) mediante termogravimetría y termogravimetría diferencial” publicado en 2007. En la investigación se estudia la degradación térmica del poli(alcohol vinílico) con diferentes grados de hidrólisis y pesos moleculares, donde se verificó que, para altos grados de hidrólisis, el mecanismo de degradación en estado sólido corresponde al desprendimiento de grupos laterales formando agua en cantidades de orden estequiométrico.

En la Escuela de Ingeniería Química de la Universidad de San Carlos de Guatemala se han realizado diversos estudios de cinética de reacciones químicas, de las cuales se considera pertinente mencionar las siguientes:

1. Optimización de la operación de un reactor de laboratorio a temperatura y concentración constante para una reacción homogénea de primer orden, utilizando la reacción de pseudo primer orden de hidrólisis de la sacarosa con ácido clorhídrico diluido para producir la inversión de la sacarosa.

Trabajo de graduación presentado por Francisco Abel Rosales Cerezo en 1986. El estudio indica los factores a tomar en cuenta al operar un reactor a nivel de laboratorio.

2. Evaluación de un reactor tubular de laboratorio para una reacción homogénea e irreversible de segundo orden (sistema acetato de etilo hidróxido de sodio) donde se obtienen valores precisos de los parámetros cinéticos relativos a la hidrólisis alcalina del acetato de etilo mediante la operación del reactor tubular. Trabajo de graduación presentado por Walter Oswaldo Zelada Sánchez en 1988. En el estudio se analiza una reacción de hidrólisis básica de ésteres.
3. Validación del uso de un reactor modificado del tipo discontinuo para la hidrólisis alcalina del acetato de etileno monitoreada por conductimetría para ser utilizado en estudios de cinética química. Trabajo de graduación presentado por Zaid Jacobo Lou Díaz en 2007. Este estudio cimienta un precedente del uso de conductimetría para monitorear una reacción de hidrólisis alcalina.
4. Evaluación de la cinética de reacción de conversión de piedra caliza a cal viva por efecto de tres temperaturas, utilizando un tamaño de partícula y un tiempo determinado a 640 mm hg de presión barométrica a nivel laboratorio. Trabajo de graduación presentado por Henry Estuardo Quiñones Fernández en 2015. Este estudio fundamenta un precedente del uso de gravimetría para monitorear una reacción.





## 2. MARCO TEÓRICO

### 2.1. Reacción química

Es un proceso en el cual se rompen y se crean enlaces químicos que son, básicamente, la unión de átomos por la interacción de electrones en común. “Al describir las reacciones químicas se suele adoptar un punto de vista microscópico y enfocado en las partículas, átomos, iones o moléculas, de las sustancias. En gran medida la estequiometría de la reacción nos suministra las relaciones que necesitamos para relacionar cantidades macroscópicas de sustancias con el punto de vista microscópico de las reacciones.”<sup>1</sup> Las reacciones químicas cumplen con la ley de conservación de la masa, la cual postula que la masa de los reactivos es igual a la suma de las masas de los productos.

Las reacciones químicas tienen distintos tipos de clasificaciones. De forma general, se pueden clasificar en reacciones de síntesis de adición, reacciones de descomposición, reacciones de desplazamiento simple o sustitución y reacciones de doble desplazamiento o doble sustitución.

Otras clasificaciones pueden presentarse según el calor involucrado, ya sea exotérmica si liberan calor o endotérmica si absorbe calor o también según el estado de agregación de los compuestos involucrados, si todos se encuentran en la misma fase la reacción es homogénea de lo contrario es heterogénea.

---

<sup>1</sup> PETRUCCI, Ralph; HERRING, Geoffrey; MADURA, Jeffry; BISSONNETTE, Carey. *Química General*. p. 111.

## 2.2. Cinética de reacción

La cinética química es el estudio de las velocidades y del mecanismo por medio de los cuales una especie química se transforma en otra. “La palabra mecanismo indica todos los procesos individuales colisionales o elementales en los que intervienen moléculas (o átomos radicales o iones) que se verifican simultánea o consecutivamente, produciendo la velocidad total observada.”<sup>2</sup> La cinética química también considera todos los factores que influyen sobre esta y explica la magnitud de esta velocidad de reacción con un modelo matemático.

“Esto es de gran importancia para las distintas ramas de la química ya que permite profundizar como se forman y rompen los enlaces químicos, estimar sus energías y estabilidades.”<sup>3</sup> Para un ingeniero químico conocer la cinética de reacción le permite hacer un diseño adecuado, controlar y optimizar el proceso químico.

### 2.2.1. Teoría de colisiones

La teoría cinética molecular de los gases desarrollada por Maxwell, Boltzmann, entre otros, supone que las moléculas de los gases chocan con frecuencia unas con otras. A partir de esta teoría se desarrollaría luego la teoría de colisiones que establece que las reacciones químicas ocurren como resultado de los choques entre moléculas de reactivos. Aplicando la teoría de colisiones a la cinética química, se esperaría que la velocidad de una reacción química sea directamente proporcional al número de colisiones moleculares por segundo (frecuencia de colisiones moleculares). A partir de este principio se explica la relación de velocidad de reacción respecto a la concentración, ya que,

---

<sup>2</sup> SMITH, Joe. *Ingeniería de la cinética química*. p. 26.

<sup>3</sup> LEVENSPIEL, Octave. *Ingeniería de las reacciones químicas*. p. 3.

al duplicar la concentración de los reactivos en un sistema, se duplica también la probabilidad de colisión entre los reactivos, ya que existiría el doble de moléculas que podrían reaccionar entre sí.

### 2.2.1.1. Velocidad de reacción

Se dice que una reacción química ocurre cuando un número detectable de moléculas ha perdido su identidad y ha asumido una nueva forma por un cambio en el tipo o el número de átomos del compuesto o por un cambio en la estructura o configuración de dichos átomos. Bajo esta conceptualización el cambio químico no supone creación ni destrucción de materia más bien un reordenamiento de la misma. En otras palabras, la masa total del sistema se conserva. Sin embargo, al tratar la masa individual de las especies involucradas en la reacción química si se habla de velocidad de desaparición de masa o moles. Seleccionando un componente  $i$  para definir la velocidad en función de ese componente. Si la velocidad de cambio en el número de moles de ese componente debido a la reacción es  $dN_i/dt$ , entonces la velocidad de reacción en sus diferentes formas se define de los modos siguientes:

- Basada en la unidad de volumen del fluido reactante:

$$r_i = \frac{1}{V} \frac{dN_i}{dt} \quad [\text{Ec. 1}]$$

- Basada en la unidad de masa de sólido en los sistemas sólido-fluido:

$$r_i' = \frac{1}{m} \frac{dN_i}{dt} \quad [\text{Ec. 2}]$$

- Basada en la unidad de superficie de interfase en los sistemas de dos fluidos o en la unidad de superficie de sólido en los sistemas gas-sólido o sólido-fluido:

$$r_i'' = \frac{1}{S} \frac{dN_i}{dt} \quad [\text{Ec. 3}]$$

A partir de las ecuaciones 1, 2 y 3 estas definiciones intensivas de velocidad de reacción están relacionadas por:

$$V * r_i = m * r_i' = S * r_i'' \quad [\text{Ec. 4}]$$

### 2.2.2. Mecanismo de reacción

El mecanismo de reacción es la descripción de la secuencia de reacciones elementales que deben ocurrir para que los reactivos se transformen en los productos de la reacción. En la mayor parte de los casos, el mecanismo postulado es una teoría ideada para explicar los resultados finales observados en los experimentos.

Por lo general, en el mecanismo de reacción aparecen especies intermediarias llamados productos intermediarios o complejo activado, “un complejo activado determinado existe sólo de forma momentánea, por lo que algunas veces se utiliza como sinónimo el termino estado de transición para referirse a esta configuración”<sup>4</sup>. Como cualquier otra teoría, la de los mecanismos de reacción está sujeta a modificaciones al transcurrir el tiempo porque se obtienen nuevos datos o se establecen nuevos conceptos referentes a las interacciones químicas.

---

<sup>4</sup> LEVINE, Ira. *Fisicoquímica*, Volumen 2. p. 1098.

### 2.2.3. Ley de velocidad

La velocidad de desaparición de un compuesto  $i$  en una reacción química depende de la temperatura, composición, presión y otros factores. En el caso de muchas reacciones donde los productos y reactivos son no compresibles se puede modelar la velocidad de reacción como el producto de una constante y una función de las concentraciones de las diversas especies que participan en la reacción. La ecuación algebraica que relaciona la velocidad de reacción  $r$  con las concentraciones de las especies se denomina expresión cinética o ley de velocidad y viene dada por la ecuación:

$$-r_i = k_i * f(C_i, C_A, \dots) \quad [\text{Ec. 5}]$$

Asumiendo que la reacción es irreversible se puede simplificar a:

$$-r_i = k_i * [C_i]^m [C_A]^n \dots \quad [\text{Ec. 6}]$$

“La constante  $k$  de la ley de velocidad se conoce como constante de velocidad o velocidad específica. La magnitud de  $k$  cambia con la temperatura y por lo tanto determina cómo afecta la temperatura a la velocidad. Los exponentes  $m$  y  $n$  por lo general son números enteros pequeños (usualmente 0, 1 o 2).”<sup>5</sup>

#### 2.2.3.1. Constante de velocidad de reacción

La constante de velocidad de reacción  $k$  no es una verdadera constante, solo es independiente de las concentraciones de las especies que intervienen en la reacción. Generalmente,  $k$  también conocida como velocidad de reacción

---

<sup>5</sup> BROWN, Theodore. *Química La Ciencia Central*. p. 581.

específica, depende marcadamente de la temperatura, aunque en reacciones en fase gaseosa, también depende del catalizador y se podría ver afectada por la presión total. Además, también puede verse afectada por otros parámetros, como concentración iónica o el disolvente mismo. Estas otras variables, por lo regular, tienen un efecto mucho menor que el efecto de la temperatura sobre la velocidad de reacción específica por lo que, generalmente, se asume que  $k$  depende únicamente de la temperatura. Este supuesto ha funcionado de forma aceptable en el estudio de las reacciones a nivel laboratorio y a nivel industrial.

Para cuantificar la dependencia de la velocidad específica de reacción  $k$  respecto a la temperatura el químico Arrhenius propuso una ecuación que se conoce como la ecuación de Arrhenius:

$$k_i(T) = f_c * e^{-E_a/RT} \quad [\text{Ec. 7}]$$

“Esta expresión se ajusta bien a los datos experimentales en un amplio intervalo de temperaturas y, desde diferentes puntos de vista, se considera como una primera aproximación adecuada para el estudio del efecto de la temperatura sobre la ecuación cinética.”<sup>6</sup>

Otra expresión similar a la ecuación de Arrhenius aparece en la “teoría de estado de transición” formulada por Eyring-Polanyi. Equivale, de modo trivial, a la ecuación de Arrhenius. Esta ecuación puede derivarse de la termodinámica estadística en la teoría cinética de gases.

$$k_i(T) = \left(\frac{k_B T}{h}\right) e^{-\frac{\Delta G^\ddagger}{RT}} \quad [\text{Ec. 8}]$$

---

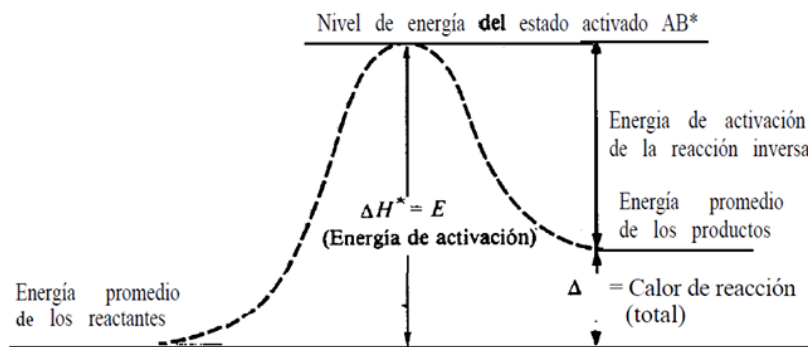
<sup>6</sup> LEVENSPIEL, Octave. *Ingeniería de las reacciones químicas*. p. 24.

La ecuación de Eyring-Polanyi se puede reescribir en función de la entalpía y entropía de activación, sustituyendo  $\Delta G^\ddagger = \Delta H^\ddagger - T\Delta S^\ddagger$ .

### 2.2.3.2. Energía de activación

Se considera como la energía mínima que deben poseer las moléculas de reactivos para que ocurra una reacción. Según la teoría cinética de los gases el factor  $E_a/RT$  de la ecuación 7 da la fracción de las colisiones entre moléculas que juntas tienen esta energía mínima.

Figura 3. Niveles de energía de los estados inicial, activado y final (reacción endotérmica)



Fuente: SMITH, Joe. *Ingeniería de la cinética química*. p. 73.

La energía de activación se determina, experimentalmente, efectuando la reacción a temperaturas distintas para luego linealizar los datos a partir de la ecuación 7.

### 2.2.3.3. Orden de reacción

El término orden está relacionado con los exponentes de la ecuación de velocidad (Ec. 6) y se utiliza de dos maneras, el orden de reacción parcial

respecto a cada reactivo y el orden de reacción global que es la suma de todos los órdenes de reacción parcial involucrados. En resumen, el comportamiento esperado para cada orden se resume en la siguiente tabla:

Tabla I. **Comportamiento para la reacción hipotética A → Productos**

Orden	Ec. De velocidad	Ec. Integrada	Transformación lineal	Vida media
0	$-r_A = k$	$C_{At} = -kt + C_{A0}$	$C_{At} = f(t)$	$\frac{C_{A0}}{2k}$
1	$-r_A = kC_A$	$\ln(C_{At}) = -kt + \ln(C_{A0})$	$\ln(C_{At}) = f(t)$	$\frac{0,693}{k}$
2	$-r_A = kC_A^2$	$\frac{1}{C_{At}} = kt + \frac{1}{C_{A0}}$	$\frac{1}{C_{At}} = f(t)$	$\frac{1}{kC_{A0}}$

Fuente: PETRUCCI, Ralph; HERRING, Geoffrey; MADURA, Jeffrey; BISSONNETTE, Carey.

*Química General.* p. 621.

Debe de tomarse en cuenta que en términos estrictos la velocidad de reacción debería ir dadas en función de las actividades y no de las concentraciones de la siguiente manera:

$$-r_i = k * (\gamma_i[C_i])^m (\gamma_A[C_A])^n \dots \quad [\text{Ec. 9}]$$

Sin embargo, en la mayoría de los casos los coeficientes de actividad (que multiplicados por la concentración definen la actividad) se mantienen prácticamente constantes a lo largo de las reacciones por lo que, generalmente, quedan incluidos en la velocidad de reacción específica para dejar la velocidad de reacción en función de la concentración.

$$k_i = k * \gamma_i^m \gamma_A^n \dots \quad [\text{Ec. 10}]$$



#### 2.2.3.4. Ley de velocidad para reacciones fluido – partícula sólida

Para reacciones heterogéneas en las que un gas o un líquido se ponen en contacto con un sólido, reaccionan con él, y lo transforman en un producto. Se pueden dar tres casos, donde los productos sean todos fluidos, sólidos o fluidos y sólidos.

En el caso de que se formen productos sólidos o cuando las partículas sólidas contienen gran cantidad de impurezas, puede ser que el tamaño del sólido no varíe apreciablemente durante la reacción, “esto ocurre en reacciones como lo son la tostación (oxidación) de menas sulfuradas para producir óxidos metálicos, la nitrogenación del carburo de cálcico para producir cianamida o en el tratamiento de protección de superficies sólidas por procesos tales como el recubrimiento de metales”<sup>7</sup>.

Si se forman productos fluidos, los productos migran de la fase sólida a la fase líquida o gaseosa, reduciendo el tamaño de partícula del sólido, por lo que también existe una etapa de transferencia de masa que puede ser una etapa controlante. “Los ejemplos más comunes de reacciones fluido-partícula sólida en la que varía el tamaño del sólido son las reacciones de materiales carbonosos, tales como briquetas de carbón, madera, etc, con bajo contenido de ceniza para producir calor y las reacciones por disolución, el ataque de trozos pequeños de metales por ácidos y la oxidación del hierro”<sup>8</sup>.

Se debe tener en cuenta que, en el tratamiento de las reacciones heterogéneas, requiere dos factores además de los encontrados normalmente

---

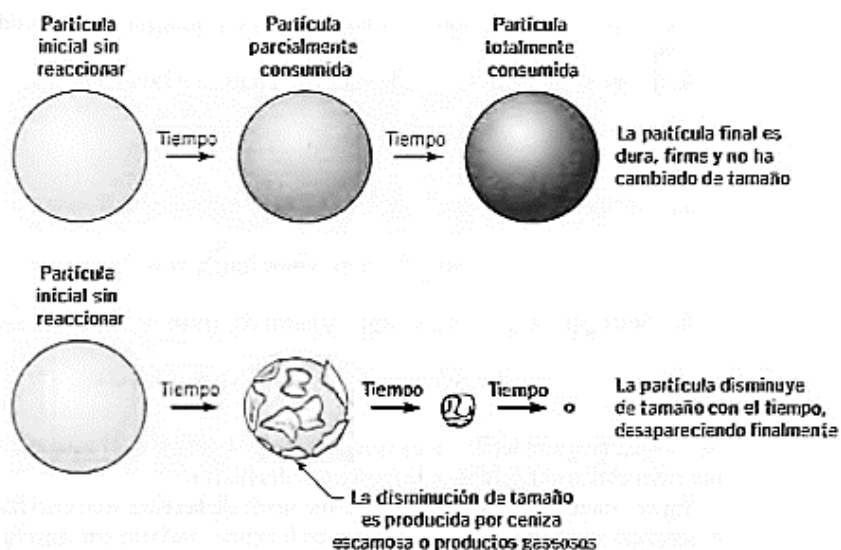
<sup>7</sup> LEVENSPIEL, Octave. *Ingeniería de las reacciones químicas*. 3 ed. p. 566.

<sup>8</sup> *Ibíd.* p. 567.

en las reacciones homogéneas, la modificación de las expresiones cinéticas debido a la transferencia de masa entre fases y el esquema de contacto entre las fases que reaccionan. Estos efectos de resistencia se pueden atenuar si se tiene buena agitación en el sistema, de manera que la capa límite se reduzca logrando que la migración entre fases se facilite.

Para las reacciones no catalíticas de partículas sólidas con el fluido que las rodea se consideran dos modelos simples idealizados, el modelo de conversión progresiva y el modelo de núcleo que se encoge sin reaccionar. En el caso del modelo de la conversión progresiva se dice que el fluido tiene acceso al interior de la partícula por lo que el sólido se está convirtiendo de forma continua y progresiva. En el modelo del núcleo que se encoge sin reaccionar, se considera que la reacción solo se produce en la superficie exterior de la partícula considerando que se puede generar una capa de material completamente convertido que dificulte la reacción.

Figura 4. **Diferentes tipos de comportamiento de partículas reactivas sólidas**



Fuente: LEVENSPIEL, Octave. *Ingeniería de las reacciones químicas*. p. 567.

“Las pruebas en un gran número de situaciones indican que en la mayoría de los casos el modelo del núcleo que se encoge sin reaccionar se ajusta mejor al comportamiento real de las partículas que el modelo de conversión progresiva. Las observaciones de combustión de carbón, madera, briquetas y periódicos prensados firmante favorecen también el modelo del núcleo que se encoge sin reaccionar”<sup>9</sup>.

Aplicando el modelo del núcleo que se encoge sin reaccionar, para un sólido B reaccionando con un fluido A y estos se asumen como partículas esféricas despreciando la resistencia por difusividad. Entonces, la ley de velocidad se puede escribir como:

$$-\frac{1}{S} * \frac{dN_B}{dt} = -\frac{1}{4\pi r^2} * \frac{dN_B}{dt} = bkC_A^\alpha \quad [\text{Ec. 11}]$$

Para aplicar este modelo es útil monitorear la proporción en la cual el sólido B ha reaccionado mediante la fracción de conversión que se define como:

$$X_B = 1 - \frac{N_B}{N_{B0}} = 1 - \frac{m_B}{m_{B0}} \quad [\text{Ec. 12}]$$

Donde  $X_B$  es la fracción de conversión del sólido B,  $N_B$  son los moles de B sin reaccionar y  $N_{B0}$  son los moles iniciales de B. Este cálculo también se puede realizar con base en la masa, reemplazando los moles iniciales por la masa inicial y los moles sin reaccionar por la masa sin reaccionar. La fracción de conversión es un número que va de 0 indicando que no ha reaccionado nada del sólido B, hasta un valor de 1 indicando que el sólido B ha reaccionado en su totalidad.

---

<sup>9</sup> LEVENSPIEL, Octave. *Ingeniería de las reacciones químicas*. p. 570.


## 2.3. Polímeros

Los polímeros son macromoléculas formadas por la unión mediante enlaces covalentes de una o más unidades simples llamadas monómeros. Estos forman grandes cadenas que se unen entre sí por fuerzas de Van der Waals, puentes de hidrógeno o interacciones hidrofóbicas. El almidón, la celulosa, la seda y el ADN son ejemplos de polímeros naturales. El nailon, el polietileno y la baquelita son algunos polímeros sintéticos.

“El alto peso molecular de los polímeros permite que estas fuerzas crezcan lo bastante para impartir a las sustancias excelente resistencia, estabilidad dimensional y otras propiedades mecánicas.”<sup>10</sup>

Figura 5. **Algunos polímeros lineales, sus monómeros y sus unidades repetitivas**

Polímero	Monómero	Unidad repetitiva
Polietileno	$\text{CH}_2=\text{CH}_2$	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
Poli(cloruro de vinilo)	$\text{CH}_2=\text{CHCl}$	$-\text{CH}_2\text{CHCl}-$
Poliisobutileno	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_2=\text{C} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ -\text{CH}_2-\text{C}- \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$
Poliestireno*	$\begin{array}{c} \text{CH}_2=\text{CH} \\   \\ \text{C}_6\text{H}_5 \end{array}$	$\begin{array}{c} -\text{CH}_2-\text{CH}- \\   \\ \text{C}_6\text{H}_5 \end{array}$
Policaprolactama (nylon 6)	$\begin{array}{c} \text{H}-\text{N}(\text{CH}_2)_5\text{C}-\text{OH} \\   \quad \quad \quad    \\ \text{H} \quad \quad \quad \text{O} \end{array}$	$\begin{array}{c} -\text{N}(\text{CH}_2)_5\text{C}- \\   \quad \quad \quad    \\ \text{H} \quad \quad \quad \text{O} \end{array}$
Poliisopreno (caucho natural)	$\begin{array}{c} \text{CH}_2=\text{CH}-\text{C}=\text{CH}_2 \\   \quad \quad \quad   \\ \quad \quad \quad \text{CH}_3 \end{array}$	$\begin{array}{c} -\text{CH}_2\text{CH}=\text{C}-\text{CH}_2- \\   \quad \quad \quad   \\ \quad \quad \quad \text{CH}_3 \end{array}$

\* Por convención el símbolo  se utiliza a todo lo largo del libro para representar el anillo bencénico, habiéndose omitido los dobles enlaces.

Fuente: BILLMEYER, Fred. *Ciencia de los polímeros*. p. 4.

<sup>10</sup> BILLMEYER, F. W. *Ciencia de los polímeros*. 2 ed. p. 5.

Según sus aplicaciones los polímeros pueden clasificarse en:

- Recubrimientos. Son sustancias que se adhieren a las superficies de los materiales para otorgarle alguna propiedad, como resistencia a la abrasión.
- Fibras. Se utilizan para confeccionar tejidos debido a su alto módulo de elasticidad y baja extensibilidad.
- Adhesivos. Son sustancias que combinan una alta cohesión y alta adhesión, por lo que se utilizan para unir dos o más cuerpos por contacto superficial directo.
- Elastómeros. Son polímeros que, al someterlos a un esfuerzo, se deforman considerablemente, pero recuperan su forma inicial al eliminar el esfuerzo.
- Plásticos. Son los polímeros que, ante un esfuerzo suficientemente intenso, se deforman irreversiblemente.

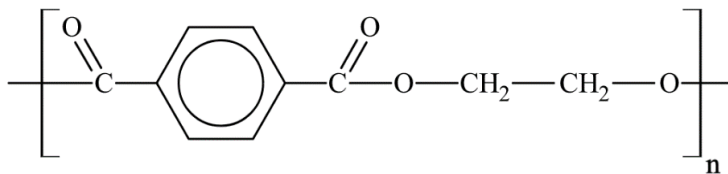
Los polímeros se pueden clasificar según su comportamiento al elevar la temperatura en:

- Termoestables. No fluyen, al calentarlos, se descomponen en otros compuestos en vez de fluir.
- Termoplásticos. Polímeros que fluyen al calentarlos y se vuelven a endurecer al enfriarlos.
- Elastómero. Presentan un comportamiento elástico que pueden ser deformados fácilmente sin modificar su estructura, sin necesidad de calentarlos.

El tereftalato de polietileno es un tipo de plástico muy usado en envases de bebidas y textiles. Pertenece al grupo de materiales sintéticos denominados

poliésteres. Químicamente, el tereftalato de polietileno es un polímero que se obtiene mediante una reacción de policondensación entre el ácido tereftálico y el etilenglicol. Industrialmente, puede ser procesado mediante extrusión, inyección, inyección y soplado debido a que este polímero es un termoplástico es decir que se torna maleable al incrementar la temperatura.

Figura 6. **Estructura de Lewis del tereftalato de polietileno**



Fuente: *PET*. <http://www.kerwa.ucr.ac.cr/bitstream/handle/10669/15405/ANEXO%201-PET.pdf>

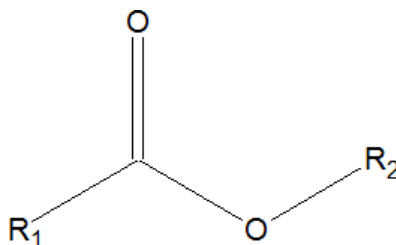
Consulta: 15 de diciembre de 2017.

Las principales propiedades del tereftalato de polietileno son su transparencia, alta resistencia al desgaste, buena resistencia química y térmica, compatibilidad con otros materiales barrera, se puede reciclar y es adecuado para el empaque de alimentos. Estas propiedades han sido las razones por la que el material ha alcanzado un papel importante en la producción de envases y fibras textiles.

### 2.3.1. Ésteres

Los ésteres son compuestos orgánicos en los cuales un grupo orgánico (simbolizado por R') reemplaza a un átomo de hidrógeno (o más de uno) en un ácido carboxílico. Generalmente, se obtienen a partir de la condensación de un ácido carboxílico y un alcohol, liberando agua. El proceso se denomina esterificación. La fórmula general de un éster es como muestra la figura 7.

Figura 7. **Estructura de Lewis de un éster**



Fuente: WADE, Leroy. *Química Orgánica, Volumen 2*. p. 2.

Los ésteres pueden participar en los enlaces de hidrógeno como aceptadores, pero no pueden participar como donadores en este tipo de enlaces, a diferencia de los alcoholes de los que derivan. Esta propiedad los convierte en más hidrosolubles que los hidrocarburos que los derivan.

El nombre de los ésteres comienza con la parte del ácido y luego con la parte alquílica o arílica. Tanto en la nomenclatura común como en la IUPAC, la terminación “ico” del ácido se reemplaza por el sufijo “ato”.

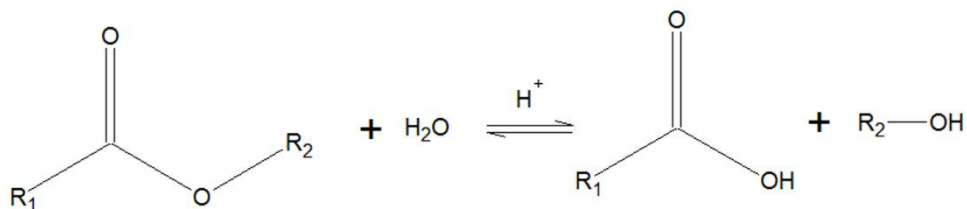
### **2.3.1.1. Hidrólisis de ésteres**

El proceso inverso a la esterificación se conoce hidrólisis de los ésteres y en este proceso se recuperan el ácido carboxílico y el alcohol de los que provino el éster. Este proceso se puede dar en medio ácido o básico.

#### **2.3.1.1.1. Hidrólisis ácida**

En la hidrólisis en medio ácido, el éster reacciona con agua en medio ácido para formar un ácido débil y un alcohol. Este tipo de hidrólisis es reversible.

Figura 8. **Hidrólisis ácida de un éster**



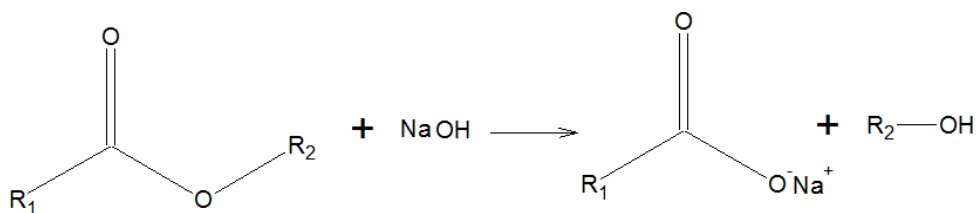
Fuente: WINGROVE, Alan. *Química Orgánica*. p. 1105.

“El hidrógeno libre ataca al C del grupo carbonilo formando un carbocatión. Esto permite que el agua, levemente nucleofílica, reaccione con el compuesto dándose así una sustitución nucleofílica en la que se sustituye el grupo R' por un OH”<sup>11</sup>.

#### 2.3.1.1.2. **Hidrólisis alcalina**

En la hidrólisis alcalina de los ésteres, también conocida como saponificación, estos reaccionan con el hidróxido de potasio formando un carboxilato de potasio y un alcohol, como se ve en la figura siguiente.

Figura 9. **Hidrólisis básica de un éster**



Fuente: WINGROVE, Alan. *Química Orgánica*. p. 1106.

<sup>11</sup> WINGROVE, Alan. *Química Orgánica*. p. 1105.

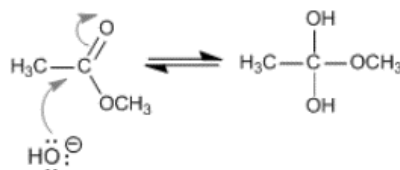


“En la hidrólisis alcalina el OH<sup>-</sup> al ser un nucleófilo fuerte ataca al carbono del grupo carbonilo, rompiendo el doble enlace y formando un anión intermediario que finalmente libera al grupo R' y se estabiliza por resonancia”<sup>12</sup>. Esto hace que la molécula del producto sea demasiado más estable que las de reactivos por lo que el equilibrio tiende a irse hacia el lado de los productos haciendo la reacción prácticamente irreversible.

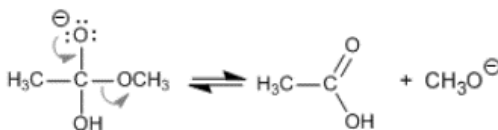
El mecanismo de esta reacción consiste en tres etapas, en un mecanismo de adición eliminación. En la primera etapa ocurre un ataque nucleófilo, donde se adiciona el grupo hidróxido al carbonilo del éster. En la segunda etapa se elimina el metóxido y en la tercera etapa se equilibran las cargas.

Figura 10. **Mecanismo de reacción de la hidrólisis básica de un éster**

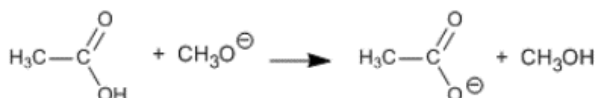
**Etapas 1.** Ataque nucleófilo



**Etapas 2.** Eliminación



**Etapas 3.** Equilibrio ácido-base

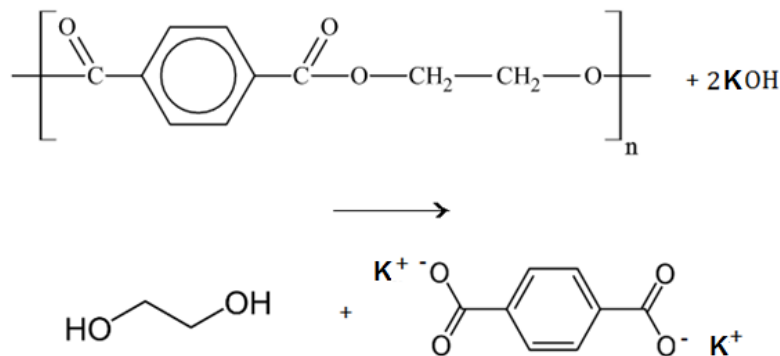


Fuente: FERNÁNDEZ, German. *Hidrólisis ésteres*. <http://www.quimicaorganica.net/esteres-hidrólisis.html> Consulta: 15 de diciembre de 2017.

<sup>12</sup> WINGROVE, Alan. *Química Orgánica*. p. 1106.

La reacción del tereftalato de polietileno con hidróxido de potasio despolimeriza el plástico formando una sal del ácido tereftálico y etilenglicol. En la reacción se observa que se requieren 2 equivalentes de hidróxido de potasio para reaccionar con un monómero del tereftalato de polietileno.

Figura 11. **Hidrólisis básica del tereftalato de polietileno**



Fuente: SPASESKA, *Alkaline Hydrolysis of poly(ethylen terephthalate) recycled from the postconsumer soft-drink bottles*.[http://dl.uctm.edu/journal/node/j2010-4/2\\_Spaseska\\_379-384.pdf](http://dl.uctm.edu/journal/node/j2010-4/2_Spaseska_379-384.pdf) Consulta: 16 de diciembre de 2017.

## 2.4. Conductividad electrolítica

Según la ley de ohm la resistencia eléctrica es igual a la diferencia de potencial dividida entre la corriente eléctrica y se refiere a la resistencia que opone el material al flujo de electrones a través de sí. El recíproco de la resistencia es la conductancia eléctrica cuya unidad es el siemens (S) en el sistema internacional. La conductancia eléctrica se define de la siguiente forma:

$$G = \kappa \frac{A_T}{l} \quad [\text{Ec. 13}]$$

“Para estudios conductimétricos se utiliza la variable conductividad en vez de la conductancia y así se deja a un lado el efecto de las variables área y

longitud”<sup>13</sup>. Esta variable es la constante de proporcionalidad que aparece en la ecuación 11 ( $\kappa$ ), es una variable intensiva y es una medida de la capacidad para conducir electricidad, su medida en el sistema internacional es el siemens por metro (S/m).

“La conductividad eléctrica de las soluciones de electrolitos es una función de la concentración, el tipo de electrolito, solvente, temperatura y presión de trabajo”<sup>14</sup>. Para cuantificar el efecto de la concentración se definió una nueva variable conocida como conductividad molar ( $\Lambda$ ). Esta variable está definida como la conductividad eléctrica dividida entre la concentración. Es decir:

$$\Lambda = \frac{\kappa}{c} \quad [\text{Ec. 14}]$$

El paso de corriente eléctrica por una solución iónica es un fenómeno más complejo que el paso de corriente por un metal. “En el metal los electrones transportan toda la corriente. En la solución iónica, la corriente es transportada por el movimiento de iones positivos y negativo. En consecuencia, el paso de corriente va acompañado del fenómeno de transporte de materia”<sup>15</sup>.

#### 2.4.1.1. Electrolitos débiles

Los electrolitos débiles suelen producir menos iones por su disociación parcial respecto a los electrolitos fuertes. Por eso, presentan un descenso más pronunciado de la conductividad molar al aumentar la concentración respecto a los electrolitos fuertes. Debe de tomarse en cuenta que, en este caso, el grado de disociación afecta considerablemente la conductividad molar. “Para el agua

---

<sup>13</sup> CAPARELLI, A. L. *Fisicoquímica básica*. p. 923.

<sup>14</sup> *Ibid.*

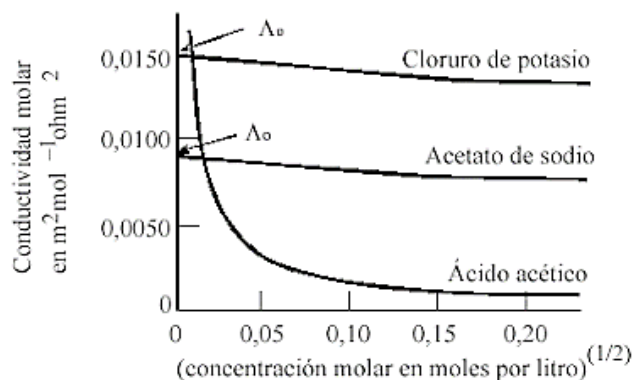
<sup>15</sup> CASTELLAN, G. W. *Fisicoquímica*. p. 819.

como disolvente el  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CO}_2$  y  $\text{CH}_3\text{COOH}$  son ejemplos de electrolitos débiles”<sup>16</sup>.

### 2.4.1.2. Electrolitos fuertes

Es importante hacer notar que, para los electrolitos fuertes existe un sinfín de teorías que pretenden explicar su comportamiento. Los electrolitos fuertes se disocian por completo, por lo que su conductividad molar tiende a ser casi constante a diferentes concentraciones. “Para el agua como disolvente el  $\text{NaCl}$ ,  $\text{HCl}$  y  $\text{MgSO}_4$  son ejemplos de electrolitos fuertes”<sup>17</sup>. Si se baja la concentración hasta tener una dilución infinita se obtiene un valor de conductividad molar conocido como conductividad molar a dilución infinita ( $\Lambda^\circ$ ) la cual se puede determinar teóricamente a partir de la ley de Kohlrausch de la migración independiente de iones.

Figura 12. Variación de la conductividad molar en función de  $\sqrt{c}$  para algunas disoluciones acuosas de electrolitos a 25 °C



Fuente: Ley de Kohlrausch. <http://pbmusc.blogspot.com/2013/02/ley-de-kohlrausch.html>

Consulta: 20 de diciembre de 2017.

<sup>16</sup> LEVINE, I. N. *Fisicoquímica*, Volumen 1. 5 ed. p. 359.

<sup>17</sup> *Ibíd.*

Esta ley postula que “cada ion efectúa su propia contribución a la conductividad molar sin importar la naturaleza del otro ion con el cual está asociado”<sup>18</sup>. Por lo que se puede determinar la conductividad molar a dilución infinita teórica a partir de las conductividades iónicas de cada ion. Es decir:

$$\Lambda^0 = \lambda_+^0 + \lambda_-^0 \quad [\text{Ec. 15}]$$

Los valores de las conductividades iónicas o conductividades iónicas molares (como también se les conoce) no son más que las conductividades molares a dilución infinita para un ion específico, determinadas a partir de la ley de Kohlrausch de la migración independiente de iones.

Tabla II. **Conductividades iónicas molares en agua a 25°C (a dilución infinita)**

Catión	$\lambda_+(\text{S cm}^2 \text{ mol}^{-1})$	Anión	$\lambda_-(\text{S cm}^2 \text{ mol}^{-1})$
<b>H<sup>+</sup></b>	<b>349.6</b>	<b>OH<sup>-</sup></b>	<b>199.1</b>
Na <sup>+</sup>	50.1	Cl <sup>-</sup>	76.4
K <sup>+</sup>	73.5	Br <sup>-</sup>	78.1
Zn <sup>2+</sup>	105.6	SO <sub>4</sub> <sup>-2</sup>	160.0
Mg <sup>2+</sup>	106.1	Ac <sup>-</sup>	40.9
NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	73.4	Fe(CN) <sub>6</sub> <sup>4-</sup>	442.3
Ba <sup>2+</sup>	127.2	I <sup>-</sup>	76.8

Fuente: *Conductividad en disoluciones electrolíticas*.  
[https://www.uv.es/qflab/2017\\_18/descargas/cuadernillos/qf1/castellano/Teoria/Conductividad-F.pdf](https://www.uv.es/qflab/2017_18/descargas/cuadernillos/qf1/castellano/Teoria/Conductividad-F.pdf) Consulta: 20 de diciembre de 2017.

<sup>18</sup> CAPARELLI, A. L. *Fisicoquímica básica*. p. 930.

## 2.5. Espectroscopia molecular

El espectro de una molécula brinda información relacionada con su geometría (longitudes de enlace) y los estados energéticos de los cuales obtenemos las fuerzas de enlace. “El espectro molecular depende de las características de los movimientos nuclear y electrónico con base a la aproximación de Born-Oppenheimer”<sup>19</sup>. El espectro de la molécula es producto de los movimientos nucleares de rotación y vibración de los núcleos atómicos y los movimientos electrónicos de los enlaces.

### 2.5.1. Espectroscopia por rayos infrarrojos

La espectroscopia por rayos infrarrojos se emplea comúnmente para identificar y determinar cuantitativamente la presencia de distintas sustancias en mezclas. La identificación de un compuesto se basa en la existencia de las frecuencias características de absorción de ciertos grupos de átomos que tienen aproximadamente el mismo valor sin importar el compuesto.

La porción infrarroja del espectro electromagnético se divide en tres regiones, el infrarrojo cercano, medio y lejano, nombrados así por su relación con el espectro visible. El infrarrojo lejano se encuentra, aproximadamente, entre  $400 - 10 \text{ cm}^{-1}$  posee baja energía y puede ser usado en espectroscopia rotacional. El infrarrojo medio se encuentra aproximadamente entre  $4000 - 400 \text{ cm}^{-1}$  puede ser usado para estudiar la estructura rotacional, vibracional y las vibraciones fundamentales. El infrarrojo cercano  $14000 - 4000 \text{ cm}^{-1}$  puede excitar sobretonos o vibraciones armónicas.

---

<sup>19</sup> CASTELLAN, G. W. *Fisicoquímica*. 2 ed. p. 659.

Para identificar los grupos funcionales con espectroscopia infrarroja se considera que el espectro de absorción se divide en las siguientes zonas:

- De 4 000 a 2 900  $\text{cm}^{-1}$ : tensión de C-H, O-H y N-H
- De 2 500 a 2 000  $\text{cm}^{-1}$ : tensión de triples enlaces y dobles enlaces acumulados
- De 2 000 a 1 500  $\text{cm}^{-1}$ : tensión de C=O, C=N y C=C
- De 1 500 a 600  $\text{cm}^{-1}$ : zona de la huella dactilar (flexión de enlaces CH, CO, CN, CC, etc.)

Tabla III. **Bandas características de grupos funcionales para microscopia infrarroja**

Grupo funcional	Numero de onda ( $\text{cm}^{-1}$ )	Grupo funcional	Numero de onda ( $\text{cm}^{-1}$ )
OH (enlace de hidrógeno)	3 100-3 200	-C $\equiv$ C-	2 300-2 100
OH (sin enlace de hidrógeno)	3 600	-C $\equiv$ N	~ 2 250
Cetonas	1 725-1 700	-N=C=O	~ 2 270
Aldehídos	1 740-1 720	-N=C=S	~ 2 150
Aldehídos y cetonas $\alpha,\beta$ -insaturados	1 715-1 660	C=C=C	~ 1 950
Ciclopentanonas	1 750-1 740	NH	3 500-3 300
Ciclobutanonas	1 780-1 760	C=N-	1 690-1 480
Ácidos carboxílicos	1 725-1 700	NO <sub>2</sub>	1 650-1 500 1 400-1 250
Ésteres	1 750-1 735	S=O	1 070-1 010
Ésteres $\alpha,\beta$ -insaturados	1 750-1 715	Sulfonas	1 350-1 300 1 150-1 100
$\delta$ -Lactonas	1 750-1 735	Sulfonamidas y sulfonatos	1 370-1 300 1 180-1 140
$\gamma$ -lactonas	1 780-1 760	C-F	1 400-1 000
Amidas	1 690-1 630	C-Cl	780-580
-COCl	1 815-1 785	C-Br	800-560
Anhidridos	1 850-1 740	C-I	600-500

Fuente: *Elucidación estructural: espectroscopía de infrarrojo*.

<http://www.ugr.es/~quiorred/espec/ir.htm> Consulta: 21 de diciembre de 2017.

Para compuestos aromáticos, las bandas características de los grupos funcionales pueden desplazarse levemente debido a la hibridación electrónica del ciclo, tal el caso del ácido tereftálico cuyas bandas características son las siguientes:

Tabla IV. **Bandas características del espectro infrarrojo del ácido tereftálico**

<b>Numero de onda (cm<sup>-1</sup>)</b>	<b>Correspondencia</b>
2 300 – 3 500	OH, ácido carboxílico
1 692	C=O, ácido carboxílico
1 511, 1 575	C=C, aromático
1 287	C-OH, ácido
783	Patrón de sustitución para

Fuente: *Spectrum 3: Terephthalic acid (R1. C4)*.

<http://www.chem.ucla.edu/~bacher/General/30BL/problems/spectroscopy/assignmentW14/key.html>  
Consulta: 21 de diciembre de 2017.



### 3. DISEÑO METODOLÓGICO

#### 3.1. Variables

A continuación, se presentan las variables dependientes e independientes involucradas en la experimentación.

Tabla V. **Variables de evaluación experimentales**

Variable	Unidad	Factor de diseño		Tipo de variable	
		Constante	Variante	Independiente	Dependiente
Temperatura de reacción	°C		X	X	
Tamaño de partícula	mm		X	X	
Frecuencia de agitación	rpm	X		X	
Masa inicial de tereftalato de polietileno	g	X		X	
Volumen del reactor	ml	X		X	
Concentración inicial de hidróxido de potasio	mol/l	X		X	
Presión	atm	X		X	
Conductividad eléctrica	mS/cm		X		X
Velocidad de reacción	mol/s		X		X

Fuente: elaboración propia.

Tabla VI. **Valor o rango aplicado a cada variable**

Variable	Unidad	Valor o rango de trabajo
Temperatura de reacción	°C	50,0 – 90,0
Tamaño de partícula	mm	2,000 – 0,420
Frecuencia de agitación	rpm	120
Masa de tereftalato de polietileno	G	15,000
Volumen del reactor	ml	250,0
Concentración de hidróxido de potasio	mol/l	2,00

Fuente: elaboración propia.

## **3.2. Delimitación del campo de estudio**

Se delimito el estudio de acuerdo a las siguientes pautas.

### **3.2.1. Fundamento de conocimiento**

El presente estudio se basa en la cinética química, termodinámica clásica y fisicoquímica. Para monitorear la reacción estudiada se aplicaron técnicas analíticas de conductimetría y gravimetría. Los productos obtenidos en la reacción se caracterizaron con espectroscopia infrarroja.

### **3.2.2. Proceso**

Caracterización de la despolimerización del tereftalato de polietileno, por medio de la reacción de hidrólisis básica con hidróxido de potasio, para estimar los parámetros de la ley de velocidad de reacción y propiedades termodinámicas de activación para la reacción.

### **3.2.3. Localización**

La metodología experimental de la investigación se llevó a cabo en la Universidad de San Carlos de Guatemala, en el Laboratorio de Fisicoquímica de la Escuela de Ingeniería Química.

### **3.2.4. Condiciones ambientales**

La metodología experimental se trabajó en un ambiente con temperatura promedio entre 18 a 22 °C, humedad relativa media entre 59 a 76 % y una presión atmosférica promedio de 0,840 atm.

### 3.3. Recursos humanos disponibles

Investigador: Walther Rodolfo Solís Portillo

- Profesión: estudiante de Ingeniería Química de la Universidad de San Carlos de Guatemala.

Asesor: Ing. William Eduardo Fagiani Cruz

- Profesión: Ingeniero Químico. Profesor del área de fisicoquímica de la escuela de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, USAC.

### 3.4. Recursos materiales disponibles

A continuación, se describe el equipo que se utilizó para cada procedimiento.

Tabla VII. **Equipo y cristalería para montaje de reactor**

<b>Equipo</b>	<b>Descripción/Uso</b>	<b>Cantidad</b>
Agitador	Con capacidad de 300 rpm.	1
Beaker de 1 000mL	Para el baño de María.	1
Conductímetro	Para monitorear la reacción.	1
Plancha de calentamiento	Para calentar el beaker a la temperatura deseada.	1
Termómetro	Para monitorear la temperatura.	1
Parafilm	Sellar el reactor.	1
Vidrio de reloj	Para cubrir el beaker.	1
Agitador	Mezclar la solución	1

Fuente: elaboración propia.

Especificaciones del conductímetro:

- Marca: Atlas Scientific
- Modelo: EC-KIT-10

- Rango: 0,1 - 1 000,0 mS/cm
- Resolución: 0,1
- Desviación típica: +/- 1%
- Dimensiones: 12 mm x 155 mm
- Peso: 51 g
- Presión máxima: 1379 kPa
- Rango de temperatura: 1 a 110 °C
- Tiempo de respuesta: 90 % en 1 segundo

Tabla VIII. **Equipo y cristalería para la preparación de los reactivos de la reacción química**

<b>Equipo</b>	<b>Descripción</b>	<b>Cantidad</b>
Balanza analítica	Digital	1
Espátula	Metálica	1
Tamiz	Mesh #10,#12, #20, #25, #40 y #45	1
Vidrio de reloj	Cristalería	1
Varilla de agitación	Cristalería	1
Balón aforado	Capacidad de 1 000mL	1
Beaker	Capacidad de 250mL	1

Fuente: elaboración propia.

Especificaciones de la balanza analítica:

- Marca: RADWAG
- Modelo: WPS 750C/1
- Máxima capacidad: 750 g
- Mínimo valor de medición: 1.0 mg
- Voltaje: 110 v

Tabla IX. **Equipo y cristalería para la separación del tereftalato de polietileno sin reaccionar de la solución y precipitación del ácido tereftálico**

<b>Equipo</b>	<b>Descripción</b>	<b>Cantidad</b>
Embudo	Cristalería	1
Earlenmeyer	Capacidad de 500mL	1
Pipeta	Capacidad de 10mL	1
Beaker	Capacidad de 100mL	3
Balón aforado	Capacidad de 1 000mL	1
Desecador	Con gel de sílice	1
Papel filtro	Tamaño de poro de 10µm	1

Fuente: elaboración propia.

A continuación, se describen los reactivos que se utilizaron para llevar a cabo la investigación planteada.

Tabla X. **Reactivos necesarios**

<b>Reactivo</b>	<b>Cantidad por corrida</b>	<b>Corridas</b>	<b>Cantidad total</b>
Tereftalato de polietileno pulverizado	15 g	18	270 g
Hidróxido de potasio	28 g	18	504 g
Ácido clorhídrico fumante al 37%	10 ml	18	180 ml
Agua desmineralizada	250 ml	18	4 500 ml

Fuente: elaboración propia.

### **3.5. Técnica cualitativa y cuantitativa**

El trabajo de investigación es de carácter experimental y se trabajó con técnicas cuantitativas debido a la naturaleza de las variables.

Basado en medidas de gravimetría, donde se cuantificó del peso del polímero sin reaccionar, se estudió el efecto de la temperatura y tamaño de

partícula en la conversión fraccionaria de tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización.

Basado en medidas de conductividad eléctrica, calculando de manera indirecta la concentración de hidróxido de potasio en solución, se obtuvo el modelo cinético de la reacción, aplicando el modelo del núcleo que se encoge sin reaccionar, despreciando la resistencia por difusión.

Los productos de la reacción se analizaron de forma cuantitativa mediante espectroscopía infrarroja, analizando las bandas características del producto obtenido.

### 3.6. Recolección y ordenamiento de la información

Se realizaron experimentos para tres temperaturas y tres tamaños de partícula del tereftalato de polietileno, dando un total de 9 tratamientos, cada uno con dos repeticiones resultando en 18 corridas experimentales. Las cuales fueron nombradas de la siguiente manera:

Tabla XI. **Nomenclatura de las corridas experimentales**

	<b>T<sub>1</sub> (50 °C)</b>	<b>T<sub>2</sub> (70 °C)</b>	<b>T<sub>3</sub> (90 °C)</b>
<b>Ø<sub>1</sub> (2,000 mm)</b>	(T1Ø1)1, (T1Ø1)2	(T2Ø1)1, (T2Ø1)2	(T3Ø1)1, (T3Ø1)2
<b>Ø<sub>2</sub> (0,841 mm)</b>	(T1Ø2)1, (T1Ø2)2	(T2Ø2)1, (T2Ø2)2	(T3Ø2)1, (T3Ø2)2
<b>Ø<sub>3</sub> (0,420 mm)</b>	(T1Ø3)1, (T1Ø3)2	(T2Ø3)1, (T2Ø3)2	(T3Ø3)1, (T3Ø3)2

Fuente: elaboración propia.

Para la reducción de los errores sistemáticos se realizaron los ensayos con un orden aleatorio según la siguiente tabla:

Tabla XII. **Plan de ejecución de ensayos experimentales**

No.	Ensayo	Semana								
		1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	(T3Ø1)1	■								
2	(T3Ø3)2	■								
3	(T3Ø2)2		■							
4	(T1Ø1)2		■							
5	(T1Ø1)1			■						
6	(T1Ø2)1			■						
7	(T2Ø3)2				■					
8	(T3Ø1)2				■					
9	(T2Ø2)1					■				
10	(T1Ø3)2					■				
11	(T1Ø3)1						■			
12	(T3Ø2)1						■			
13	(T3Ø3)1							■		
14	(T2Ø1)2							■		
15	(T2Ø2)2								■	
16	(T2Ø1)1								■	
17	(T2Ø3)1									■
18	(T1Ø2)2									■

Fuente: elaboración propia.

### 3.6.1. **Curva de calibración de concentración de hidróxido de potasio – conductividad eléctrica**

- Se pesó 112,2 g de hidróxido de potasio.
- Se disolvió los 112,2 g de hidróxido de potasio en agua destilada en un vaso de precipitados.
- Se vertió la solución disuelta en un balón aforado de 1 000ml.
- Se aforó la solución de hidróxido de potasio en el balón.

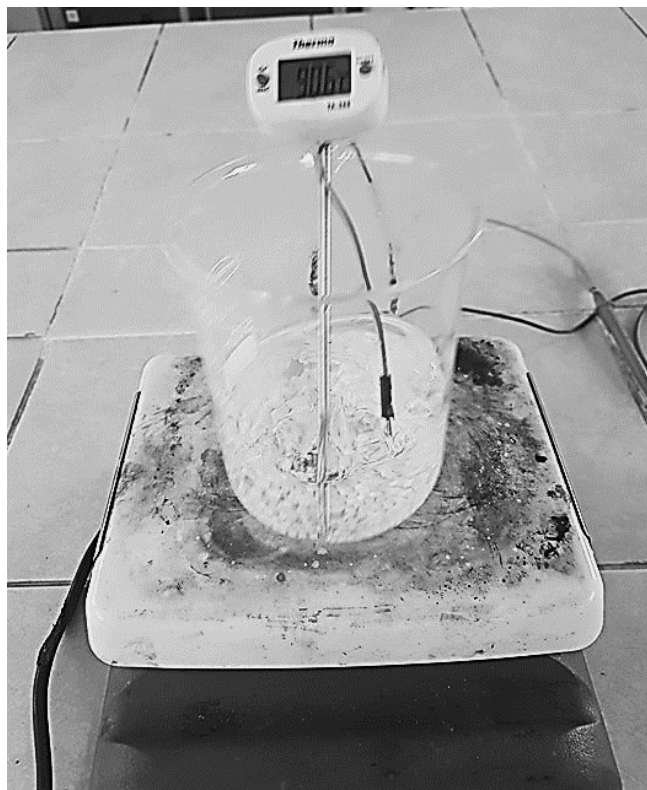
- Se tomó 50ml de la solución de hidróxido de potasio.
- Se calentó la solución a 50 °C y se midió su conductividad eléctrica.
- Se calentó la solución a 70 °C y se midió su conductividad eléctrica.
- Se calentó la solución a 90 °C y se midió su conductividad eléctrica.
- Se diluyó la alícuota de hidróxido de potasio y se repitió las mediciones de conductividad eléctrica para concentraciones de 1,75 M, 1,50 M, 1,25 M, 1,00 M, 0,75 M, 0,50 M, 0,25M.
- Se midió la conductividad eléctrica del agua destilada a 50, 70 y 90 °C

### **3.6.2. Monitoreo de la conductividad eléctrica durante la reacción**

- Se preparó una solución de hidróxido de potasio 2,0 M.
- Se pesó 15 g de tereftalato de polietileno.
- Se vertió 250 ml de la solución de hidróxido de potasio en un vaso de precipitados.
- Se calentó la solución a la temperatura deseada con la plancha de calentamiento.
- Se agregó el tereftalato de polietileno a la solución.
- Se selló el vaso de precipitados con parafilm.
- Se abrieron dos aperturas en el parafilm para introducir la sonda del conductímetro y la punta del termómetro.
- Se tomó la medición de la conductividad eléctrica en intervalos de 5 minutos durante 1 hora controlando que la temperatura se mantuviera constante.
- Se filtró la solución para separar el tereftalato de polietileno sin reaccionar de la solución de ácido tereftálico.



Figura 13. **Montaje del equipo**



Fuente: Laboratorio de Físicoquímica, Facultad de Ingeniería, edificio T5, USAC.

### **3.6.3. Determinación de la fracción de conversión del tereftalato de polietileno**

- Se pesó el papel filtro.
- Se separó con el papel filtro el tereftalato de polietileno de la solución luego de 1 hora de reacción.
- Se secó la muestra filtrada.
- Se pesó el papel filtro con el tereftalato de polietileno residual sin reaccionar.

#### **3.6.4. Caracterización de los productos de la reacción**

- Se agregó 50 ml de ácido clorhídrico 0,5 M a la solución filtrada luego de la reacción.
- Se filtró el precipitado obtenido.
- Se secó el sólido obtenido.
- Se envió la muestra obtenida a un laboratorio de análisis para obtener el espectro infrarrojo del sólido extraído.
- Se identificó el compuesto extraído mediante su espectro infrarrojo.

#### **3.6.5. Calibración del conductímetro**

- Se vertió 50 ml de la solución patrón de conductividad en un vaso de precipitados.
- Se midió la temperatura con un termómetro.
- Se ajustó la conductividad según la referida por el patrón a esa temperatura.

### **3.7. Tabulación, ordenamiento y procesamiento de la información**

En esta sección se detallan las tablas utilizadas para recolectar los datos experimentales, así como los métodos empleados para obtener los resultados. Los resultados obtenidos se organizaron en tablas y gráficas para su fácil interpretación.

Sé utilizó el programa Microsoft Excel 2016 para realizar la tarea ordenamiento y procesamiento del cálculo de los resultados presentados en la sección de datos calculados.

### 3.7.1. Tabulación de datos experimentales obtenidos

Para el ordenamiento de los datos obtenidos se utilizaron 9 tablas distintas, estas tablas con los datos obtenidos experimentalmente se presentan en el anexo bajo la sección de datos originales.

Se utilizó una tabla para almacenar los datos para la elaboración de la curva de calibración que relaciona la concentración de hidróxido de potasio con la conductividad eléctrica. Se utilizaron dos tablas para almacenar los datos gravimétricos del experimento, una tabla para cada repetición. Para finalizar, se utilizaron tres tablas para almacenar los datos de conductividad a lo largo de la reacción, cada tabla corresponde a una de las tres temperaturas a las que fue realizado el experimento.

### 3.7.2. Cálculo de la concentración de hidróxido de potasio a partir de la conductividad eléctrica

Con los datos de la curva de calibración se calculó un modelo lineal para cada temperatura para establecer la relación entre la conductividad eléctrica y la concentración de hidróxido de potasio. Esta regresión lineal se obtuvo mediante el método de mínimos cuadrados. De manera que para calcular la concentración se aplicó el siguiente modelo:

$$C^{KOH} = \kappa_{sol} * m_{\kappa T} + b_{\kappa T} \quad [\text{Ec. 16}]$$

Donde los valores de  $m_{\kappa T}$  y  $b_{\kappa T}$  dependen de la temperatura.

### 3.7.3. Cálculo de la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno mediante gravimetría

Para calcular la conversión fraccionaria mediante gravimetría, primero se obtuvo la masa de tereftalato de polietileno sin reaccionar restando la masa del papel filtro de la muestra filtrada.

$$m^{PET} = m^{PET+PF} - m^{PF} \quad [\text{Ec. 17}]$$

Luego, se aplica la siguiente ecuación conociendo que la masa inicial de tereftalato de polietileno ( $m_0^{PET}$ ) es de 15 g.

$$X^{PET} = 1 - \frac{m^{PET}}{m_0^{PET}} \quad [\text{Ec. 18}]$$

### 3.7.4. Cálculo de la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno mediante conductividad eléctrica

A partir de la conductividad eléctrica de la solución se aplicó la ecuación 14 para conocer la concentración de hidróxido de potasio en la solución, a partir de ese dato, se calcularon los moles consumidos durante la reacción mediante la ecuación:

$$N_c^{KOH} = V(C_0^{KOH} - C^{KOH}) \quad [\text{Ec. 19}]$$

Con el valor de los moles de hidróxido de potasio consumidos, conociendo que, por cada 2 moles consumidos de hidróxido de potasio se consume un mol del monómero del tereftalato de polietileno, por lo que se tiene la siguiente relación estequiométrica.

$$N_c^{PET} = N_c^{KOH} / 2 \quad [\text{Ec. 20}]$$

Con la cantidad de moles consumidos se calcula la masa de tereftalato de polietileno consumido mediante la masa molar del monómero, 192,168 g/mol.

$$m_c^{PET} = N_c^{PET} * m^{PET} \quad [\text{Ec. 21}]$$

Luego, se aplica la siguiente ecuación conociendo que la masa inicial de tereftalato de polietileno ( $m_0^{PET}$ ) es de 15 g.

$$X^{PET} = \frac{m_c^{PET}}{m_0^{PET}} \quad [\text{Ec. 22}]$$

### 3.7.5. Cálculo de la ley de velocidad

A partir del modelo para reacciones heterogéneas de superficies, aplicado a la reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno.

$$-\frac{1}{S} * \frac{dN^{PET}}{dt} = -\frac{1}{4\pi r_t^2} * \frac{dN^{PET}}{dt} = k_s (C^{KOH})^\alpha \quad [\text{Ec. 23}]$$

Tomando en cuenta que el radio inicial de las partículas del sólido es R entonces:

$$-\frac{1}{4\pi R^2 \left(\frac{r_t}{R}\right)^2} * \frac{dN^{PET}}{dt} = k_s (C^{KOH})^\alpha \quad [\text{Ec. 24}]$$

Asumiendo que todas las partículas se reducen de forma homogénea, entonces, la reducción del volumen de las partículas se puede relacionar con la fracción de conversión mediante la ecuación:

$$X^{PET} = 1 - \frac{V^{PET}}{V_0^{PET}} = 1 - \frac{\left(\frac{4}{3}\right)\pi r_t^3}{\left(\frac{4}{3}\right)\pi R^3} = 1 - \left(\frac{r_t}{R}\right)^3 \quad [\text{Ec. 25}]$$

Despejando la relación de radios se obtiene que:

$$\frac{r_t}{R} = (1 - X^{PET})^{1/3} \quad [\text{Ec. 26}]$$

Sustituyendo la ecuación 22 con la ecuación 23:

$$-\frac{1}{4\pi R^2(1 - X^{PET})^{\frac{2}{3}}} * \frac{dN^{PET}}{dt} = k_s(C^{KOH})^\alpha \quad [\text{Ec. 27}]$$

Realizando una transformación lineal la ecuación mediante logaritmos, con la siguiente correspondencia:

$$\ln\left(-\frac{1}{4\pi R^2(1 - X^{PET})^{\frac{2}{3}}} * \frac{dN^{PET}}{dt}\right) = \ln(k_s) + \alpha \ln(C^{KOH}) \quad [\text{Ec. 28}]$$

Donde:

- $\ln\left(-\frac{1}{4\pi R^2(1 - X^{PET})^{\frac{2}{3}}} * \frac{dN^{PET}}{dt}\right)$  Es la abscisa
- $\ln(C^{KOH})$  Es la ordenada
- $\ln(k_s)$  Es el intercepto
- $\alpha$  Es la pendiente

De forma que, con una correlación lineal, se determinó el orden de reacción y la constante de velocidad de reacción.

### 3.7.6. Determinación de las energías de activación

A partir de los datos de la constante cinética para varias temperaturas se aplicó la siguiente relación para convertir la constante cinética basada en el área superficial a la constante cinética basada en el volumen.

$$V * r_i = S * r_i'' \quad [\text{Ec. 29}]$$

Desarrollando

$$V * k_V (C_i)^\alpha = S * k_S (C_i)^\alpha \quad [\text{Ec. 30}]$$

Simplificando y despejando la ecuación:

$$k_V = k_S * \frac{S}{V} \quad [\text{Ec. 31}]$$

A partir de la constante de velocidad, con base en el volumen, se aplica el modelo de Eyring-Polanyi linealizado con la siguiente correspondencia:

$$\ln\left(\frac{k_V}{T}\right) = -\frac{\Delta H^\ddagger}{R} * \left(\frac{1}{T}\right) + \ln\left(\frac{k_B}{h}\right) + \frac{\Delta S^\ddagger}{R} \quad [\text{Ec. 32}]$$

Donde:

- $\ln\left(\frac{k_V}{T}\right)$  Es la abscisa
- $\frac{1}{T}$  Es la ordenada
- $\ln\left(\frac{k_B}{h}\right) + \frac{\Delta S^\ddagger}{R}$  Es el intercepto
- $-\frac{\Delta H^\ddagger}{R}$  Es la pendiente

De manera que, con una correlación lineal, un despeje se determinó la entalpía y entropía de activación. Para obtener la energía de Gibbs de activación se utilizó la siguiente ecuación:

$$\Delta G^\ddagger = \Delta H^\ddagger - T\Delta S^\ddagger \quad [\text{Ec. 33}]$$

### 3.7.7. Desviación de la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno calculada

Para cuantificar la desviación de la conversión fraccionaria de tereftalato de polietileno calculada mediante gravimetría y conductimetría se aplicará la siguiente ecuación:

$$d\% = \frac{|X_g^{PET} - X_c^{PET}|}{X_c^{PET}} * 100\% \quad [\text{Ec. 34}]$$

Este valor indicará el grado de concordancia entre los datos logrados, debido a que estos valores se obtienen de mediciones independientes. Con este valor se puede corroborar la exactitud de los datos.

### 3.7.8. Propagación de errores

La propagación de errores es el efecto de la incertidumbre de las mediciones en los datos calculados. En estos, propagan debido a la combinación de variables en las funciones utilizadas para el cálculo de resultados. Dada cualquier variable se cumple la siguiente relación.

$$E = f(k_1, k_2, k_3 \dots, k_n) \quad [\text{Ec. 35}]$$



Donde su incertidumbre estada dada por:

$$\delta E = \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial f}{\partial k_i} \right| \delta k_i \quad [\text{Ec. 36}]$$

### **3.8. Análisis estadístico**

El análisis estadístico se realizó para establecer tendencias en los datos y validar los resultados obtenidos tomando en consideración la incertidumbre de las medidas y la variabilidad de las repeticiones del experimento.

#### **3.8.1. Análisis de regresión lineal**

La relación entre la concentración de hidróxido de potasio y la conductividad eléctrica se obtuvo mediante un análisis de regresión lineal. Este modelo se aplicó para monitorear la reacción de manera indirecta.

Luego, se aplicó análisis de regresión para obtener un modelo aproximado del comportamiento de la fracción de conversión en función de la temperatura y tamaño de partícula. También se aplicó este análisis para la construcción de los modelos cinéticos y para la estimación de las propiedades termodinámicas de activación de la reacción.

##### **3.8.1.1. Residuos**

Se define como residuo a la diferencia entre la observación y la predicción realizada mediante el modelo calculado. Es un indicador del nivel de ajuste del modelo. El error típico o estándar ( $\hat{\sigma}$ ) se calcula con base a los residuos y es un valor representativo de la desviación esperada al aplicar el modelo calculado.

### **3.8.1.2. Significancia de los estadísticos de la regresión**

Para presentar los modelos se verifico la significancia de los estadísticos del análisis a partir de la prueba de F de Fisher con una confiabilidad del 95 %.

### **3.8.2. Análisis de varianza**

El análisis de varianza evalúa la variación de una variable dependiente en función de las variaciones de la variable independiente. También permite evaluar el error sistemático.

El análisis de varianza permite aprobar una hipótesis, ya sea la hipótesis nula o hipótesis alternativa. Este análisis compara la varianza entre las medias de los grupos y la varianza dentro de los grupos para determinar si estos forman parte de una misma población o son poblaciones separadas con características distintas. La hipótesis nula indica que, al aplicar tratamientos, las variables de respuesta son iguales, mientras que la hipótesis alternativa describe que por lo menos una de las variables respuesta difiere de las demás.

El análisis de varianza se realizó con ayuda del programa Microsoft Excel 2016. Para aceptar o rechazar las hipótesis estadísticas se utilizó el criterio de la F de Fisher, utilizando una confiabilidad del 95 %, comparando la F crítica con la F calculada, aplicando los siguientes criterios para el análisis de varianza:

- Si  $F > F_{Crítica}$ , se rechaza la hipótesis nula.
- Si  $F < F_{Crítica}$ , se acepta la hipótesis nula.

### 3.8.2.1. Factores y bloques

El estudio realizado contempla dos factores, el tamaño de partícula y la temperatura. Los datos se agruparon en bloques para realizar el análisis de varianza del efecto de la temperatura y tamaño de partícula en la fracción de conversión, para que estos no interfirieran entre sí.

Tabla XIII. **Bloques para análisis de varianza**

Efecto de la temperatura en la conversión fraccionaria						
Bloque	Ensayo					
1	(T1Ø1)1	(T1Ø1)2	(T2Ø1)1	(T2Ø1)2	(T3Ø1)1	(T3Ø1)2
2	(T1Ø2)1	(T1Ø2)2	(T2Ø2)1	(T2Ø2)2	(T3Ø2)1	(T3Ø2)2
3	(T1Ø3)1	(T1Ø3)2	(T2Ø3)1	(T2Ø3)2	(T3Ø3)1	(T3Ø3)2
Efecto del tamaño de partícula en la conversión fraccionaria						
Bloque	Ensayo					
1	(T1Ø1)1	(T1Ø1)2	(T2Ø1)1	(T2Ø1)2	(T3Ø1)1	(T3Ø1)2
2	(T1Ø2)1	(T1Ø2)2	(T2Ø2)1	(T2Ø2)2	(T3Ø2)1	(T3Ø2)2
3	(T1Ø3)1	(T1Ø3)2	(T2Ø3)1	(T2Ø3)2	(T3Ø3)1	(T3Ø3)2

Fuente: elaboración propia.

### 3.8.2.2. Análisis de potencia

La potencia estadística es la probabilidad que la hipótesis nula sea rechazada cuando la hipótesis alterna es positiva, en otras palabras, es la probabilidad de que no ocurra un falso negativo.

La potencia estadística depende de varios factores, por lo general, casi siempre depende del criterio de significación estadística utilizado en la prueba, la magnitud del efecto de interés en la población y el tamaño de la muestra usado para detectar el efecto.

Para un estudio unilateral la potencia estadística se puede estimar mediante la siguiente ecuación:

$$z_{1-\beta} = \frac{1}{2} \sqrt{n-3} \ln \left( \frac{1+R}{1-R} \right) - z_{1-\alpha} \quad [\text{Ec. 37}]$$

Donde se utiliza el estadístico z que es una medida de la cantidad de desviaciones estándar entre la medida y la media de la población,  $\beta$  es la probabilidad de un falso negativo,  $\alpha$  es la probabilidad de un falso positivo, R es el coeficiente de correlación lineal y n es el número de datos. En este caso, el valor de  $z_{1-\alpha}$  es la cantidad de desviaciones estándar necesarias para abarcar  $1 - \alpha$  del total del área de la distribución normal, este valor se puede calcular con integrales o con una tabla de valores.

A partir del valor de  $z_{1-\beta}$  se estima la potencia estadística mediante la siguiente tabla:

Tabla XIV. **Valores de  $z_{1-\alpha}$  y  $z_{1-\beta}$  más frecuentes utilizados**

Poder estadístico (%)	$\beta$	$z_{1-\beta}$	Seguridad (%)	$\alpha$	$z_{1-\alpha}$
99	0,01	2,326	80,0	0,200	0,842
95	0,05	1,645	85,0	0,150	1,036
90	0,10	1,282	90,0	0,100	1,282
85	0,15	1,036	95,0	0,050	1,645
80	0,20	0,842	97,5	0,025	1,960
75	0,25	0,674	99,0	0,010	2,326
70	0,30	0,524			
65	0,35	0,385			
60	0,40	0,253			
55	0,45	0,126			
50	0,50	0,000			

Fuente: *Cálculo del poder estadístico de un estudio.*

[https://www.fisterra.com/mbe/investiga/poder\\_estadistico/poder\\_estadistico.asp](https://www.fisterra.com/mbe/investiga/poder_estadistico/poder_estadistico.asp) Consulta: 29 de abril de 2018.

### **3.9. Plan de análisis de resultados**

Los resultados obtenidos se evaluaron acorde a las hipótesis plantadas en el estudio y se analizaron los resultados según el fundamento teórico y los modelos aplicados.

#### **3.9.1. Métodos y modelos de los datos según tipo de variables**

Se utilizó el método gravimétrico para obtener las conversiones fraccionarias del tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización para diferentes condiciones de tamaño de partícula y temperatura. Para ello, se pesó la cantidad de tereftalato de polietileno que no reaccionó durante el periodo de tiempo establecido.

El método para obtener la ley de velocidad de la reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno fue mediante conductividad eléctrica para monitorear la concentración de hidróxido de potasio aplicando el modelo del núcleo que se encoge sin reaccionar despreciando el efecto de la resistencia por difusividad como modelo teórico.

El método para obtener las propiedades termodinámicas de activación de la reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno se basa en la ecuación de Eyring-Polanyi.

El método de identificación del producto de la reacción, el ácido tereftálico, fue mediante espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier, identificando las bandas características de este compuesto.

### **3.9.2. Programas utilizados para el análisis de datos**

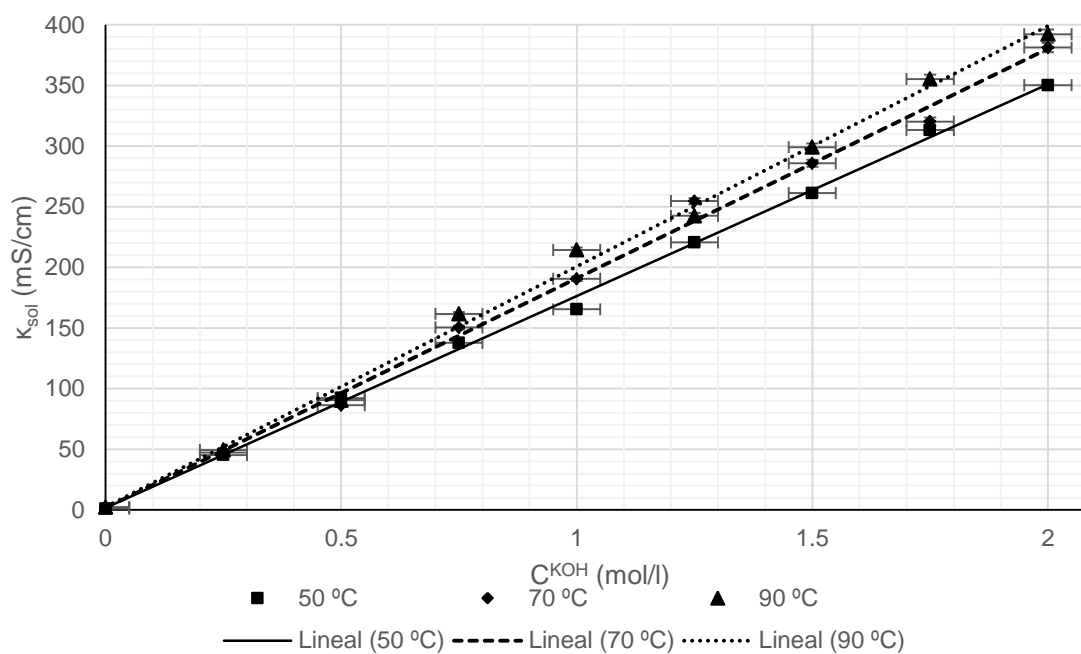
Para la tabulación, manipulación y representación gráfica de los datos se utilizaron los siguientes programas:

- Qtiplot, elaboración de gráficas y obtención de modelos matemáticos.
- Microsoft Excel 2016: Elaboración de tablas de datos y resultados.
- Microsoft Word 2016: Redacción del trabajo de investigación, ordenamientos de datos.

## 4. RESULTADOS

De conformidad con los objetivos, en esta sección se presentan gráficas, tablas y ecuaciones obtenidas a través del procedimiento de cálculo establecido.

Figura 14. **Curva de calibración, conductividad eléctrica en función de la concentración de hidróxido de potasio**



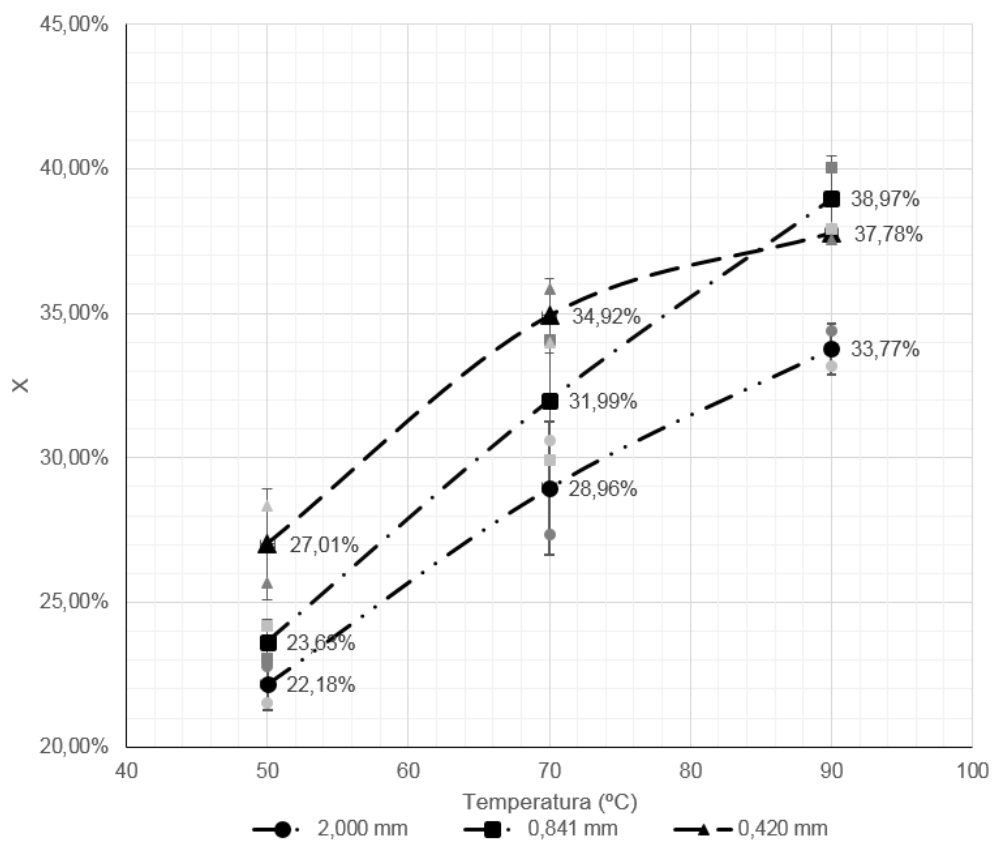
Variable independiente: $\kappa_{sol}$ (mS/cm)			
Variable dependiente: $C^{KOH}$ (mol/l)			
$T$ (°C)	Modelo	$R^2$	$\hat{\sigma}$
50	$C^{KOH} = 0,005724098\kappa_{sol} - 0,009031483$	0,9983	0,0302
70	$C^{KOH} = 0,005284574\kappa_{sol} - 0,008901337$	0,9957	0,0479
90	$C^{KOH} = 0,005043119\kappa_{sol} - 0,012562913$	0,9962	0,0453

**Potencia estadística (1- $\beta$ ): >99%**

Fuente: elaboración propia.

#### 4.1. Efecto de la temperatura sobre la cinética de despolimerización del tereftalato de polietileno

Figura 15. Conversión fraccionaria en función de la temperatura para la despolimerización del tereftalato de polietileno por hidrólisis básica con hidróxido de potasio luego de una hora de reacción



Tipo de variable	Nombre	Dimensionales	Rango	Máxima incerteza
Variable independiente	Temperatura (T)	°C	[50, 90]	0,5
Variable dependiente	Fracción de conversión ( $X^{PET}$ )	%	[22,18, 38,97]	2,94

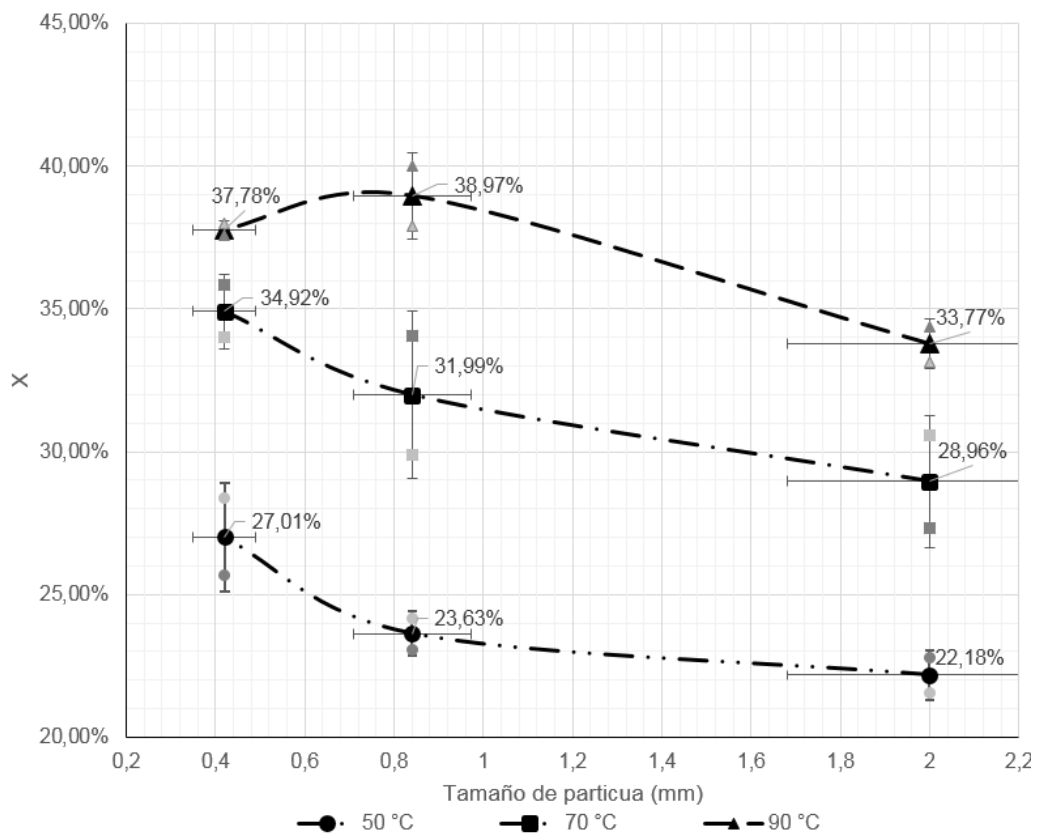
$\varnothing$ (mm)	Modelo lineal	$R^2$	$\hat{\sigma}$	$1-\beta$
2,000	$X^{PET} = 0,289916T + 8,010277$	0,9904	0,8070	>99
0,841	$X^{PET} = 0,383333T + 4,697777$	0,9973	0,5661	>99
0,420	$X^{PET} = 0,269250T + 14,391388$	0,9319	2,0589	95-99

Fuente: elaboración propia.



#### 4.2. Efecto del tamaño de partícula sobre la cinética de despolimerización del tereftalato de polietileno

Figura 16. Conversión fraccionaria en función del tamaño de partícula para la despolimerización del tereftalato de polietileno por hidrólisis básica con hidróxido de potasio luego de una hora de reacción



Tipo de variable	Nombre	Dimensionales	Rango	Máxima incerteza
Variable independiente	Tamaño de partícula ( $\emptyset$ )	mm	[0,420, 2,000]	0,320
Variable dependiente	Fracción de conversión ( $X^{PET}$ )	%	[22,18, 38,97]	2,94

T (°C)	Modelo lineal	$R^2$	$\hat{\sigma}$	$1-\beta$
50	$X^{PET} = -2,676972\emptyset + 27,184313$	0,7792	1,6486	75-80
70	$X^{PET} = -3,523949\emptyset + 35,789421$	0,9371	1,0560	95-99
90	$X^{PET} = -2,951685\emptyset + 40,049593$	0,9319	1,7752	95-99

Fuente: elaboración propia.

**4.3. Modelo de la ley de velocidad de la despolimerización por hidrólisis básica del tereftalato de polietileno con hidróxido de potasio**

Tabla XV. **Modelos de la ley de velocidad de la reacción de despolimerización de tereftalato de polietileno mediante hidrólisis básica con hidróxido de potasio**

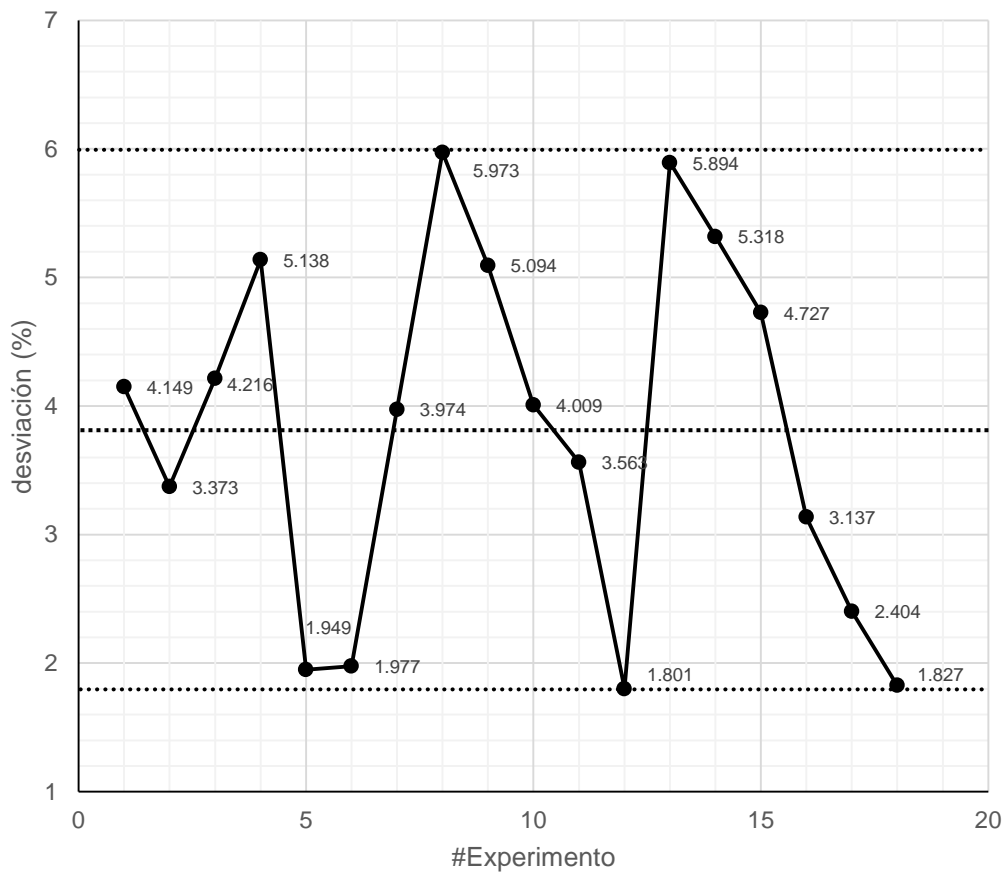
Tipo de variable	Nombre	Dimensionales:
Variable independiente	Concentración de KOH ( $C^{KOH}$ )	mol/l
Variable independiente	Área superficial (S)	m <sup>2</sup>
Variable dependiente	Velocidad de reacción ( $dN^{PET}/dt$ )	mol/min

Ø (mm)	T (°C)	modelo	R <sup>2</sup>
0,420	50	$\frac{1}{S} \frac{dN^{PET}}{dt} = 183,185053(C^{KOH})^{2,08179}$	0,8636
	70	$\frac{1}{S} \frac{dN^{PET}}{dt} = 261,009578(C^{KOH})^{2,09614}$	0,9155
	90	$\frac{1}{S} \frac{dN^{PET}}{dt} = 302,657377(C^{KOH})^{1,765467}$	0,9614
0,841	50	$\frac{1}{S} \frac{dN^{PET}}{dt} = 48,275864(C^{KOH})^{1,785446}$	0,6675
	70	$\frac{1}{S} \frac{dN^{PET}}{dt} = 57,571657(C^{KOH})^{1,697218}$	0,9167
	90	$\frac{1}{S} \frac{dN^{PET}}{dt} = 76,825307(C^{KOH})^{2,080541}$	0,8859
2,000	50	$\frac{1}{S} \frac{dN^{PET}}{dt} = 7,336852(C^{KOH})^{1,909826}$	0,6915
	70	$\frac{1}{S} \frac{dN^{PET}}{dt} = 11,219988(C^{KOH})^{1,739317}$	0,8612
	90	$\frac{1}{S} \frac{dN^{PET}}{dt} = 11,393888(C^{KOH})^{1,762078}$	0,8828

Fuente: elaboración propia.

#### 4.4. Desviación de la conversión fraccionaria calculada mediante gravimetría y conductimetría

Figura 17. Desviación de la conversión fraccionaria de tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización por hidrólisis básica con hidróxido de potasio calculada mediante gravimetría y conductimetría



<b>Desviación promedio:</b>	3,8069 %
<b>Desviación mínima:</b>	1,8009 %
<b>Desviación máxima:</b>	5,9727 %

Fuente: elaboración propia.

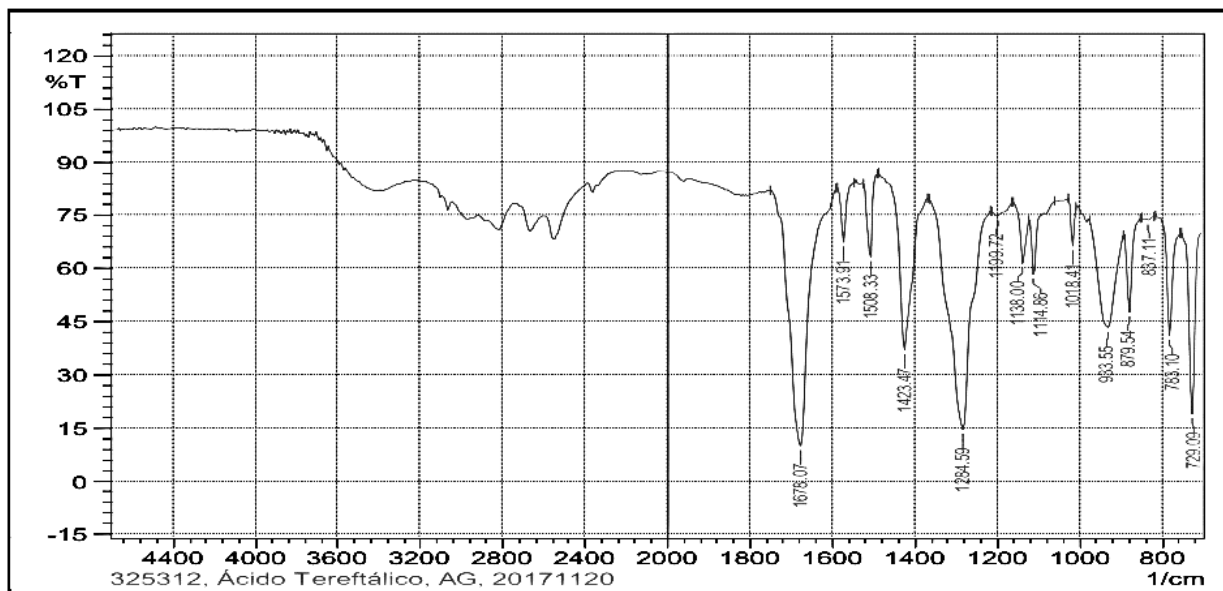
#### 4.5. Caracterización de los productos de la degradación por hidrólisis básica del tereftalato de polietileno con hidróxido de potasio

Figura 18. Espectro infrarrojo del compuesto extraído de la reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno mediante hidrólisis básica con hidróxido de potasio

Picos 1/cm	729	783	837	880	934	1018	1115	1138	1200	1285	1423	1508	1574
Area	16	12	4	8	20	3	9	5	6	48	20	4	4

Walter Solís  
Ácido tereftálico

Fecha inicio	Hora	Resolución	No escaneos	Usuario	Analista	Ident.
2017-11-20	10:43:00 a.m.	8 (1/cm)	20	Lab. Laser	AG	Corrimiento



Metodología	Análisis	MIL	Fecha de ejecución del análisis	Fecha finalización	Analista
Determinación por espectrofotometría infrarroja.	Corrimiento espectral	12.010.172	2017-11-20	2017-11-20	AG

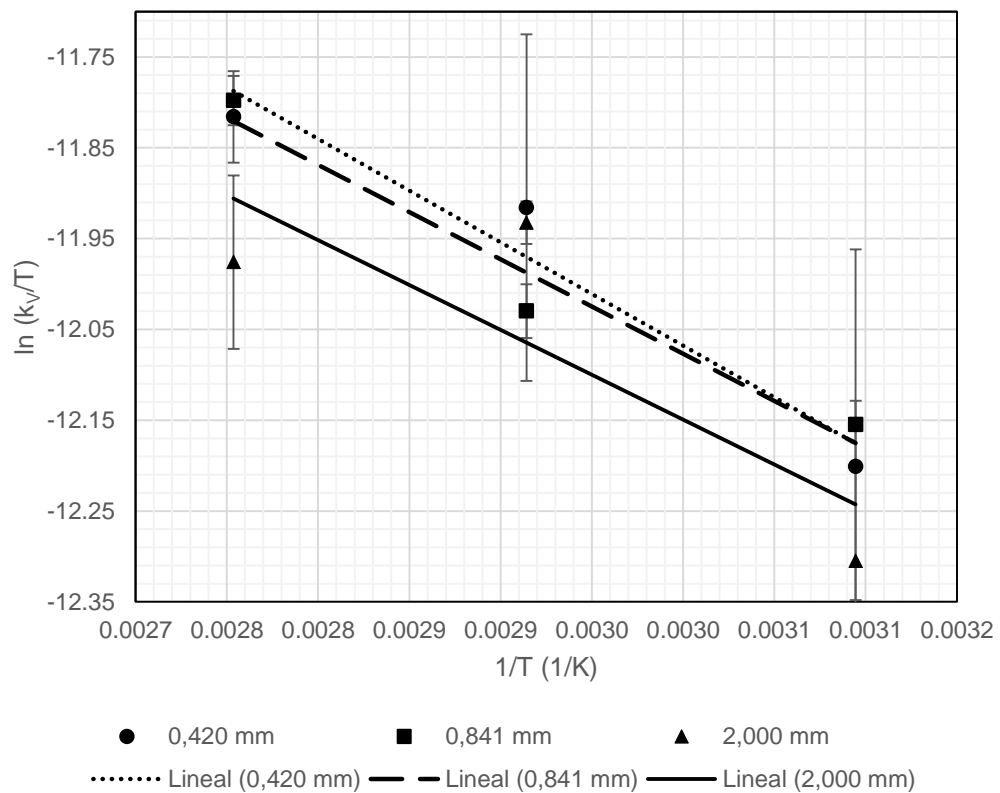
Fuente: elaboración propia, con datos obtenidos del Laboratorio de Análisis y Servicios

S.A.

**4.6. Energía libre, entalpía y entropía de activación de la reacción de despolimerización mediante hidrólisis básica del tereftalato de polietileno por medio de hidróxido de potasio**

Figura 19. **Linealización de la ecuación de Eyring-Polanyi**

$$\ln\left(\frac{k_V}{T}\right) = -\frac{\Delta H^\ddagger}{R} * \left(\frac{1}{T}\right) + \ln\left(\frac{k_B}{h}\right) + \frac{\Delta S^\ddagger}{R}$$



$\varnothing$ (mm)	pendiente	intercepto	$\Delta H^\ddagger$ J/mol	$\Delta S^\ddagger$ J/mol K	$\Delta G^\ddagger(25^\circ\text{C})$ J/mol
2,000	-1138,115	-8,653367	9 462,828	-269,500	89 814,206
0,841	-1040,097	-8,956366	8 647,856	-272,019	89 750,357
0,420	-987,637	-9,186402	8 211,683	-273,932	89 884,435
		<b>Promedio:</b>	8 774,122	-271,817	89 816,333

Fuente: elaboración propia, apéndice 25.

#### 4.7. Análisis de varianza

Conforme las hipótesis estadísticas, aquí se presentan los resultados del análisis de varianza tomando en cuenta que se aplicó una confiabilidad del 95 % para la selección de la hipótesis aceptada.

Tabla XVI. **Análisis de varianza del efecto del tamaño de partícula del tereftalato de polietileno sobre la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización mediante hidrólisis básica**

T (°C)	Probabilidad (%)	F	F <sub>crítica</sub>	Hipótesis aceptada	
				H <sub>0</sub>	H <sub>1</sub>
50	6,9906	7,3392	9,5521	X	
70	16,9418	3,3991	9,5521	X	
90	2,8917	14,4216	9,5521		X

Fuente: elaboración propia.

Tabla XVII. **Análisis de varianza del efecto de la temperatura a la que se lleva a cabo la reacción sobre la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización mediante hidrólisis básica**

Ø (mm)	Probabilidad (%)	F	F <sub>crítica</sub>	Hipótesis aceptada	
				H <sub>0</sub>	H <sub>1</sub>
2,000	1,0546	29,6908	9,5521		X
0,841	1,0046	30,7173	9,5521		X
0,420	0,8484	34,5593	9,5521		X

Fuente: elaboración propia.

Tabla XVIII. **Efecto de la temperatura sobre la constante cinética de la reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno mediante hidrólisis básica**

$\varnothing$ (mm)	Probabilidad (%)	F	F <sub>crítica</sub>	Hipótesis aceptada	
				H <sub>0</sub>	H <sub>1</sub>
2,000	4,2263	10,8628	9,5521		X
0,841	3,1023	13,6928	9,5521		X
0,420	6,0470	8,23638	9,5521	X	

Fuente elaboración propia, apéndice 26.

Tabla XIX. **Efecto de la temperatura sobre el orden de reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno mediante hidrólisis básica**

$\varnothing$ (mm)	Probabilidad (%)	F	F <sub>crítica</sub>	Hipótesis aceptada	
				H <sub>0</sub>	H <sub>1</sub>
2,000	69,6931	0,4082	9,5521	X	
0,841	43,7689	1,1020	9,5521	X	
0,420	20,9031	2,7587	9,5521	X	

Fuente: elaboración propia, apéndice 26.

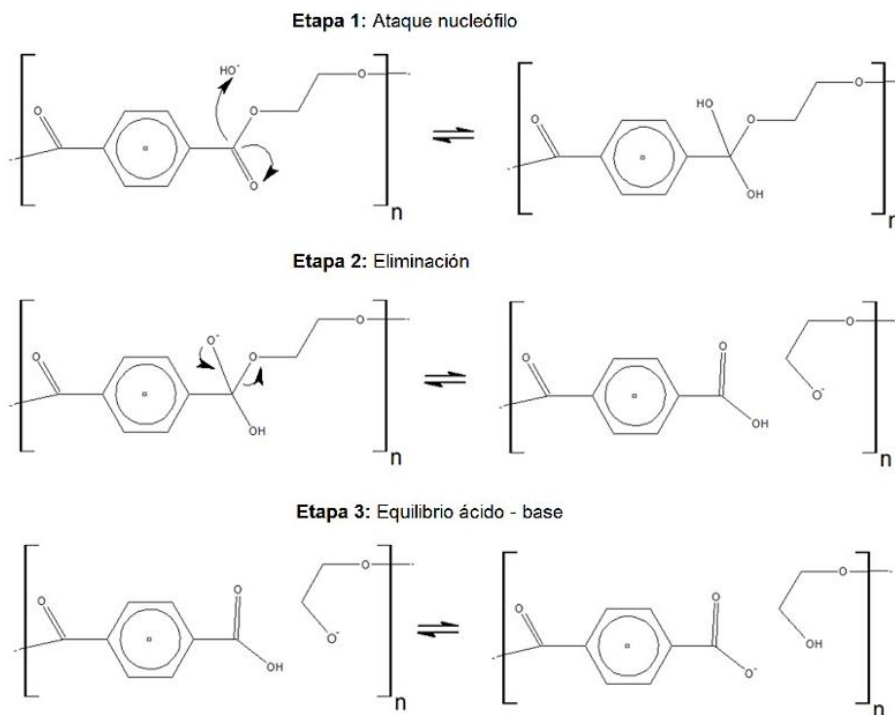




## 5. INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS

En la reacción de despolimerización del tereftalato es posible inferir que, probablemente, el hidróxido de potasio rompe la unión de la cadena del polímero atacando los ésteres de esta macromolécula (ver figura 20). Esto es posible debido a que el carbonilo en el éster, por estar enlazado a átomos de oxígeno que tienen mayor electronegatividad que el carbono, le confieren una carga parcial positiva a este átomo que, en presencia de los aniones de hidróxido ( $\text{OH}^-$ ), propicia un ataque nucleófilo entre esas moléculas. Es decir, este anión se adiciona al carbonilo. Luego de este paso, ocurre la eliminación del metóxido del carbonilo, rompiendo la cadena del polímero.

Figura 20. **Mecanismo de reacción de despolimerización**



Fuente: elaboración propia con ChemSketch.

Una vez conocida la reacción, se observa que, a medida que se consume el tereftalato de polietileno, la cantidad de iones libres en la solución disminuye dando como resultado una disminución de la conductividad eléctrica de la solución. Debido a esto es posible monitorear el avance de la reacción de forma indirecta utilizando conductimetría. Con las mediciones de conductividad eléctrica para diferentes concentraciones se generó la curva de calibración utilizada para el experimento (ver figura 14).

Se observa que existe un comportamiento fuertemente lineal entre la conductividad eléctrica y la concentración de hidróxido de potasio con una potencia estadística de más del 99 %. Debido a que la conductividad eléctrica de la solución es directamente proporcional a la cantidad de iones libres en la solución se concluye que el grado de disociación del hidróxido de potasio no varía apreciablemente en función de su concentración en el rango trabajado.

Al analizar el efecto de la temperatura, se observa que, para una concentración de hidróxido de potasio dada, la conductividad eléctrica aumenta a medida que se aumenta la temperatura. Es posible que esto se deba a que, al incrementar la temperatura, las moléculas, en promedio, cuentan con mayor energía cinética lo que produce que el grado de disociación del hidróxido de potasio aumente, generando más iones en la solución que aumentan la conductividad eléctrica. Otra razón factible es que la conductividad eléctrica en soluciones depende de la migración de iones en la solución por lo que este valor está sujeto a un fenómeno de transferencia de masa, a diferencia de los sólidos donde solo los electrones se transfieren y estos tienen una masa despreciable, por lo que, a mayor temperatura, la agitación térmica puede facilitar la transferencia de masa de manera que la conductividad eléctrica aumente.

### **5.1. Efecto de la temperatura sobre la cinética de despolimerización del tereftalato de polietileno**

La gráfica del comportamiento de la conversión fraccionaria en función de la temperatura (ver figura 15) sugiere un crecimiento proporcional al aumentar la temperatura para la fracción de conversión del tereftalato de polietileno sin importar el tamaño de partícula. Esto, posiblemente, se debe a que el incremento de la energía cinética de las moléculas de hidróxido de potasio aumenta la probabilidad de colisiones que liberen la energía suficiente para formar al complejo activado lo que produce un mayor número de choques efectivos.

La pendiente del modelo lineal calculado brinda una aproximación de cuánto tereftalato de polietileno reaccionará durante una hora si se aumenta una unidad la temperatura, en el rango de valores del experimento. Los modelos indican que el incremento de un grado en la temperatura incrementa entre 0,2696 a 0,3833 % la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno después de una hora de reacción.

### **5.2. Efecto del tamaño de partícula sobre la cinética de despolimerización del tereftalato de polietileno**

Según la figura 16 la tendencia general es a disminuir la conversión al aumentar el tamaño de partícula. Esto indica que, con la misma masa de tereftalato de polietileno al reducir el tamaño de partícula, probablemente se incrementa el área superficial del sólido, lo que facilitaría la interacción con la solución de hidróxido de potasio para iniciar su degradación.

Se puede pensar en el tereftalato de polietileno como una serie de cadenas de moléculas independientes que se unen entre sí por medio de fuerzas intermoleculares como las fuerzas de Van der Waals y los puentes de hidrógeno, por lo que con partículas más pequeñas estas fuerzas disminuyen, y se facilitaría desprender los monómeros producidos con la reacción. De esta forma se agiliza este proceso de despolimerización.

Al analizar el efecto del tamaño de partícula en la conversión fraccionaria de tereftalato de polietileno a una temperatura de 90 °C, se observa un comportamiento inesperado, donde la fracción de conversión a un tamaño de partícula de 0,841 mm es mayor a la fracción de conversión a 0,420 mm. Esto puede deberse a las incertezas de los datos.

Las incertezas en el tamaño de las partículas de tereftalato de polietileno son representativas debido a los tamices comerciales utilizados. Para obtener partículas de 2,000 mm de diámetro, primero se tamizó con un mesh #10 que cuenta con una dimensión de malla de 2,000 mm y luego, para remover las partículas pequeñas, se tamizó de nuevo con un mesh #12 que tiene una dimensión de malla de 1,680 mm, lo que genera una dispersión de 0,320 mm.

### **5.3. Ley de velocidad de la despolimerización por hidrólisis básica del tereftalato de polietileno con hidróxido de potasio**

Para construir la ley de velocidad se utilizó el modelo para reacciones heterogéneas del núcleo que se encoge sin reaccionar con la reacción química, como etapa controlante presentado por de Levenspiel. En este modelo, se asume que la reacción solo ocurre en la superficie del sólido y, al reaccionar el compuesto formado, migra a la fase fluida, reduciendo el tamaño de partícula.

Los modelos obtenidos (ver Tabla XV) tienen un coeficiente de determinación entre 0,6675 y 0,9167, lo que indica que estos modelos cuentan con una proporción de variabilidad no explicada de entre 8,33 a 33,25 %. Esto puede ser producto de las idealizaciones del modelo seleccionado. De forma general, los coeficientes de determinación más bajos son los que se presentan para las reacciones realizadas a 50 °C. Una de las simplificaciones del modelo que podría explicar estas desviaciones, es el despreciar la resistencia de la difusión a través del líquido del compuesto producido, lo que genera una capa en el sólido que dificulta el avance de la reacción. Esta resistencia disminuye con la temperatura ya que al introducir energía la difusividad en líquidos aumenta. Para los modelos cinéticos donde la reacción se realizó a 70 y 90 °C, todos los coeficientes de determinación se encuentran por encima de 0,85, lo que da una proporción de variabilidad no explicada menor que 15 % que es aceptable para dicho modelo.

Los modelos cinéticos indican consistentemente que la constante cinética aumenta a medida que aumenta la temperatura en el rango estudiado de 50 a 90 °C, lo que revela que la temperatura incrementa la velocidad de reacción.

El orden de reacción calculado oscila entre 1,6973 y 2,0961, por lo que el paso elemental de velocidad limitante de la reacción tiene una molecularidad aproximada de dos, es decir que dos moléculas interactúan en este paso. Al analizar detalladamente el mecanismo de reacción de la hidrólisis básica de ésteres (ver Figura 10) el primer paso de la reacción conlleva la interacción de dos moléculas, en este caso, el tereftalato de polietileno y el ion hidróxido. Los demás pasos de la reacción son unimoleculares, lo cual indica que, probablemente, el primer paso del mecanismo de reacción es el más lento y afecta, principalmente, a la velocidad de reacción.

#### **5.4. Desviación de la conversión fraccionaria calculada mediante gravimetría y conductimetría**

Al monitorear la reacción mediante dos métodos se puede tener mayor confiabilidad de los resultados debido a que se pueden cuantificar los errores del experimento. Al comparar la fracción de conversión obtenida mediante gravimetría y conductimetría (ver figura 17), se determinó que la desviación promedio obtenida es de 3,8069 %, la desviación mínima 1,8009 % y la desviación máxima de 5,9727 %.

Los valores específicos de cada corrida (ver apéndice 24) indican que la fracción de conversión de tereftalato de polietileno calculada por gravimetría es menor a la fracción de conversión de tereftalato de polietileno calculado por conductimetría. Esto indica que el error sistemático es representativo. Esta discrepancia puede haberse generado a pesar el residuo de tereftalato de polietileno sin estar completamente seco.

#### **5.5. Caracterización de los productos de la degradación por hidrólisis básica del tereftalato de polietileno con hidróxido de potasio**

La espectroscopía infrarroja brinda información acerca de los grupos funcionales presentes en la muestra. Se aplicó la técnica espectroscopía de absorción en el rango del infrarrojo medio al sólido precipitado producto de la acidificación de la solución obtenida de la reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno.

Con base en las referencias de bandas características presentadas en el marco teórico (ver tablas III y IV), comparado con el espectro obtenido (ver figura 18), en la región de 2 300 a 3 500  $\text{cm}^{-1}$  es característica de las

vibraciones de estiramiento del hidrógeno con elementos de masa 19 una o menos, en este caso corresponde al grupo OH del ácido carboxílico. La banda de absorción más prominente se encuentra en  $1\ 678,07\ \text{cm}^{-1}$  la cual corresponde al doble enlace C=O del ácido carboxílico. Las bandas en  $1\ 573,91$  y  $1\ 508,33\ \text{cm}^{-1}$  corresponden a los enlaces C=C del ciclo aromático. La banda en  $1\ 284,59\ \text{cm}^{-1}$  corresponde al enlace C-OH del ácido. La banda ubicada en  $783,10\ \text{cm}^{-1}$  indica que los sustituyentes del ciclo aromático se encuentran en posición “para”, con lo que se concluye que la sustancia obtenida coincide con el ácido tereftálico.

#### **5.6. Propiedades de activación de la reacción de despolimerización mediante hidrólisis básica del tereftalato de polietileno por medio de hidróxido de potasio**

Mediante la linealización de la ecuación Eyring-Polanyi se estimaron las propiedades de activación de la reacción estudiada (ver figura 19) el de tamaño de partícula utilizado.

La entalpia de activación de la reacción, con un valor promedio de  $8\ 774\ \text{J/kg}$ , sugiere que la formación del complejo activado es un proceso endotérmico, es decir requiere calor para que ocurra. Este valor se reduce ligeramente al disminuir el tamaño de partícula. Para un tamaño de partícula de  $2,000\ \text{mm}$  se calculó una entalpia de activación de  $9\ 462\ \text{J/mol}$  mientras que para un tamaño de partícula de  $0,420\ \text{mm}$  la entalpia de formación es de  $8\ 211\ \text{J/mol}$ , lo que representa una reducción de aproximadamente  $13,2\ \%$ . Esta disminución de la entalpia de formación puede ser producto de que, a menor tamaño de partícula, se reducen los vecinos efectivos de cada cadena de tereftalato de polietileno que dificultan los choques efectivos para que la reacción suceda.

La entropía de activación calculada tiene un valor promedio de  $-271,817$  J/mol K. Este valor indica que el complejo activado de la reacción estudiada se encuentra en un estado inestable, es decir que el proceso de formación no es espontáneo. La variación de la entropía de activación por efecto del tamaño de partícula es de menos de 1,6 %, por lo que, considerando las incertezas de las mediciones, este valor es despreciable.

La energía de Gibbs de activación a  $25\text{ }^{\circ}\text{C}$  de la reacción estudiada tiene un valor promedio de  $89\ 816$  J/mol. Esto significa que la formación del complejo activado no es un proceso espontáneo a  $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Por el signo de la entropía y la entalpía de activación se puede generalizar que el proceso de formación del complejo activado no es espontáneo para cualquier temperatura. Al igual que la entropía de activación su variación en función del tamaño de partícula es insignificante, en este caso la variación es de menos del 0,2 %.

## **5.7. Análisis de varianza**

Para comprobar la significancia del efecto de las variables de control sobre las variables de respuesta, se aplicó la prueba de F de Fisher con un grado de confiabilidad de 95 %. La hipótesis nula ( $H_0$ ) enuncia que la variable de control es independiente a la variable de respuesta, mientras que la hipótesis alterna ( $H_1$ ) indica que la variable de control afecta de manera significativa a la variable de respuesta.

En el análisis del tamaño de partícula del tereftalato de polietileno sobre la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización mediante hidrólisis básica (ver tabla XVI), indica que el tamaño de partícula no afecta significativamente a la conversión fraccionaria a



50 y 70 °C, pero a 90 °C el tamaño de partícula afecta significativamente a la conversión fraccionaria.

El análisis del efecto de la temperatura a la que se lleva a cabo la reacción sobre la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización mediante hidrólisis básica (ver tabla XVII) indica que la temperatura afecta significativamente a la conversión fraccionaria, cuando el tamaño de partícula es de 2,000, 0,841 y 0,420 mm.

El análisis del efecto de la temperatura sobre la constante cinética de la reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno mediante hidrólisis básica (ver tabla XVIII) indica que la temperatura afecta significativamente a la constante cinética de reacción, cuando el tamaño de partícula es de 2,000 y 0,841 mm, pero a 0,420 mm la temperatura afecta significativamente a la constante cinética de reacción.

El análisis del efecto de la temperatura sobre el orden de reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno mediante hidrólisis básica (ver tabla XIX) indica que la temperatura no afecta, significativamente, el orden de reacción, cuando el tamaño de partícula es de 2,000, 0,841 y 0,420 mm. Lo que significa que el mecanismo de reacción no varía en el rango de temperaturas trabajado.



## CONCLUSIONES

Para las condiciones del experimento realizado:

1. El incremento de un grado centígrado en la temperatura incrementa entre 0,2696 a 0,3833 % en la conversión fraccionaria de tereftalato de polietileno después de una hora de reacción.
2. La reducción de un milímetro en el tamaño de partícula resulta en un incremento de entre 2,6770 a 3,5239 % en la conversión fraccionaria de tereftalato de polietileno después de una hora de reacción.
3. El orden de reacción calculado oscila entre 1,6972 y 2,0961 lo que corresponde a una reacción bimolecular.
4. El valor de la conversión fraccionaria de tereftalato de polietileno calculada mediante gravimetría y conductimetría presenta una variabilidad promedio de 3,806 % y una variabilidad máxima de 5,972 %.
5. El espectro infrarrojo del sólido precipitado al agregar ácido clorhídrico a la solución obtenida de la reacción estudiada corresponde al ácido tereftálico.
6. La energía libre de Gibbs de activación, con un valor promedio de 89 816 J/mol, indica que la formación del complejo activado de la reacción estudiada no es un proceso espontáneo.

7. La entalpia de activación, con un valor promedio de 8 774 J/mol indica que la formación del complejo activado de la reacción estudiada es endotérmica.
  
8. La entropía de activación, con un valor promedio de  $- 271 \text{ J/mol K}$  indica que el complejo activado de la reacción estudiada es menos estable que los reactivos sin reaccionar.

## RECOMENDACIONES

1. Verificar que los comportamientos descritos anteriormente pueden ser extrapolados a mayores tiempos de reacción, realizando experimentos a tiempos más largos para verificar que el comportamiento predicho se cumple.
2. Determinar si existe una variación significativa en la cinética de despolimerización del tereftalato de polietileno por hidrólisis básica utilizando distintas bases fuertes.
3. Evaluar la cinética de despolimerización del tereftalato de polietileno por hidrólisis ácida con los mismos métodos planteados en este estudio.
4. Diseñar un reactor especializado para monitorear la reacción estudiada de manera que se disminuya la variabilidad de las mediciones experimentales.
5. Experimentar en un rango más amplio de temperaturas y tamaños de partículas, para verificar que se mantienen las tendencias analizadas.
6. Utilizar equipo con mayor precisión para reducir las incertezas experimentales.
7. Realizar un análisis de costos para determinar las condiciones óptimas para llevar a cabo la reacción.



## BIBLIOGRAFÍA

1. BILLMEYER, Fred W. *Ciencia de los polímeros*. 2a ed. España: Reverté, S.A., 1975. ISBN: 84-291-7048-0. 579 p.
2. BROWN, Theodore L.; LEMAY, H. Eugene.; BURSTEN, Bruce E.; MURPHY, Catherine J. *Química la ciencia central*. 11a ed. México: Pearson, 2009. ISBN: 978-608-607-442-021-0. 1240 p.
3. CAPPARELLI, Alberto Luis. *Fisicoquímica básica*. 1a ed. Argentina: REUN, 2013. ISBN: 978-950-34-0972-5. 1190 p.
4. CASTELLAN, Gilbert W. *Fisicoquímica*. 2a ed. México: Addison Wesley Iberoamericana S.A., 1987. ISBN: 968-444-316-1. 1057 p.
5. CHANG, Raymond. *Química*. 10a ed. México: McGraw-Hill, 2010. ISBN: 978-607-15-0307-7. 1107 p.
6. DÍAZ, Pértegas.; FERNÁNDEZ, Pita. *Cálculo del poder estadístico de un estudio*. [en línea] <[http://www.fisterra.com/mbe/investiga/poder\\_estadistico/poder\\_estadistico.asp](http://www.fisterra.com/mbe/investiga/poder_estadistico/poder_estadistico.asp)>. [Consulta: 29 de abril de 2018].
7. FERNANDEZ, German. *Hidrólisis de ésteres*. [en línea] <[http://www.quimicaorganica.net/esteres-hidrólisis.html](http://www.quimicaorganica.net/esteres-hidrolisis.html)>. [Consulta: 25 de diciembre de 2017].

8. FOGLER, H. Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. 4a ed. México: Pearson Educación, 2008. ISBN: 978-970-26-1198-1. 968 p.
9. LEVENSPIEL, Octave. *Ingeniería de las reacciones químicas*. 3a ed. México: Limusa Wiley, 2004. ISBN: 968-18-5860-3. 638 p.
10. LEVINE, Ira N. *Fisicoquímica*. 5a ed. España: McGraw-Hill, 2002. Vol 1. ISBN: 84-481-3786-8. 432 p.
11. \_\_\_\_\_ . *Fisicoquímica*. 5a ed. España: McGraw-Hill, 2002. Vol 2. ISBN: 84-481-3787-6. 1194 p.
12. PETRUCCI, Ralph H.; HERRING, F. Heoffrey.; MADURA, Jeffry D.; BISSONNETTE, Carey. *Química general*. 10a ed. México: Pearson, 2011. ISBN: 978-84-8322-680-3. 1399 p.
13. SMITH, James; VAN NESS, Hendrick; ABBOTT, Michael. *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*. 7a ed. México: McGraw-Hill, 2007. ISBN: 978-0-07-310445-4. 817 p.
14. SMITH, Joe M. *Ingeniería de la cinética química*. 6a ed. México: McGraw-Hill, 1991. ISBN: 978-9-68-26-0628-1. 774 p.
15. SPASESKA, Civkaroska. *Hidrólisis alcalina de poly(etileno tereftalato) reciclado de botellas de refrescos usadas*. [en línea] <[http://dl.uctm.edu/journal/node/j2010-4/2\\_Spaseska\\_379-384.pdf](http://dl.uctm.edu/journal/node/j2010-4/2_Spaseska_379-384.pdf)>. [Consulta: 16 de diciembre de 2017].



16. WINGROVE, Alan.; CARET, Robert. *Química Orgánica*. 2a ed. México: HARLA, 2001. ISBN: 978-96-8603-436-3. 1569 p.



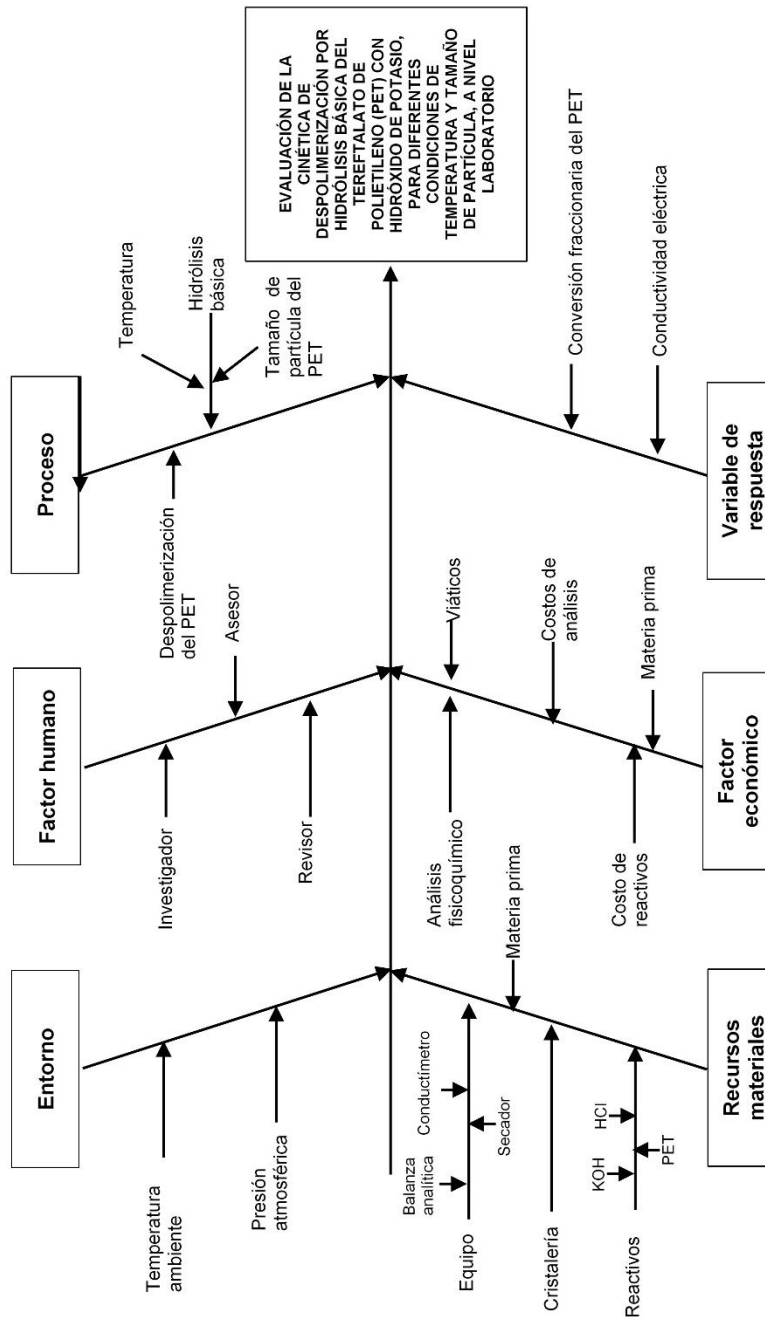
## APÉNDICES

Apéndice 1. **Tabla de requisitos académicos**

Carrera	Área	Curso	Tema
Ingeniería química	Química	Química 4	Soluciones acuosas, reacciones químicas
		Análisis cualitativo	Equilibrio de disociación
		Química orgánica	Compuestos orgánicos, ésteres, ácidos carboxílicos, sales de ácidos carboxílicos
		Química orgánica 2	Polímeros, mecanismos de reacción, hidrólisis de ésteres
		Análisis cuantitativo	Gravimetría, manejo estadístico de datos en el laboratorio, errores de medición
	Operaciones unitarias	Transferencia de masa IQ-4	Difusión, lixiviación
		Transferencia de masa en unidades continuas IQ-5	Secado de sólidos
	Fisicoquímica	Fisicoquímica 2	Conductividad eléctrica, reacciones heterogéneas.
		Cinética de procesos químicos	Ley de velocidad, métodos de determinación de ley de velocidad
	Ciencias básicas y complementarias	Estadística 1	Análisis de datos, indicadores estadísticos
		Técnicas de estudio e investigación	Método de investigación
		Programación de computadoras 1	Uso de Word y Excel

Fuente: elaboración propia.

## Apéndice 2. Diagrama de espina de pescado



Fuente: elaboración propia.

## DATOS ORIGINALES

### Apéndice 3. Mediciones de conductividad eléctrica en función de la temperatura para el hidróxido de potasio

Concentración de KOH (M)	Conductividad eléctrica (mS/cm)		
	50 °C	70 °C	90 °C
0,00	1,1	2,1	2,3
0,25	45,2	47,2	49,5
0,50	92,2	86,3	90,5
0,75	137,7	150,4	161,6
1,00	165,4	190,5	214,3
1,25	220,5	254,6	242,4
1,50	261,2	285,7	299,1
1,75	313,1	320,2	355,2
2,00	350,1	381,2	392,1

Fuente: elaboración propia, mediciones experimentales.

### Apéndice 4. Mediciones del peso de tereftalato de polietileno sin reaccionar, luego de una hora de reacción, repetición 1

			Ø (mm)		
			2,000	0,841	0,420
T (°C)	50	$m^{PF}$ (g)	1,238	1,171	1,371
		$m^{PET+PF}$ (g)	13,006	12,543	12,117
	70	$m^{PF}$ (g)	1,397	1,148	1,014
		$m^{PET+PF}$ (g)	11,808	11,661	10,914
	90	$m^{PF}$ (g)	1,059	1,246	1,262
		$m^{PET+PF}$ (g)	11,085	10,560	10,564

Fuente: elaboración propia, mediciones experimentales.

Apéndice 5. **Mediciones del peso de tereftalato de polietileno sin reaccionar, luego de una hora de reacción, repetición 2**

		$\varnothing$ (mm)			
		<b>2,000</b>	<b>0,841</b>	<b>0,420</b>	
<b>T (°C)</b>	<b>50</b>	$m^{PF}$ (g)	1,299	1,261	1,273
		$m^{PET+PF}$ (g)	12,878	12,799	12,423
	<b>70</b>	$m^{PF}$ (g)	1,360	1,230	1,293
		$m^{PET+PF}$ (g)	12,260	11,119	10,917
	<b>90</b>	$m^{PF}$ (g)	1,248	1,301	1,073
		$m^{PET+PF}$ (g)	11,090	10,297	10,436

Fuente: elaboración propia, mediciones experimentales.

Apéndice 6. **Mediciones de conductividad eléctrica en función del tiempo en la reacción de despolimerización del PET a 50 °C**

<b>Tiempo (min)</b>	<b>Conductividad eléctrica de la solución (mS/cm)</b>					
	<b>2,000 mm</b>		<b>0,841 mm</b>		<b>0,420 mm</b>	
	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>1</b>	<b>2</b>
0	350,1	350,1	350,1	350,1	350,1	350,1
5	347,8	347,8	347,5	347,6	347,0	347,3
10	345,5	345,3	345,0	345,2	343,9	344,7
15	343,3	343,0	342,5	342,8	341,0	342,0
20	341,2	340,7	340,2	340,5	338,2	339,5
25	339,2	338,6	337,9	338,4	335,4	337,2
30	337,1	336,4	335,6	336,1	332,6	334,8
35	335,1	334,3	333,4	334,1	330,1	332,4
40	333,3	332,3	331,5	332,0	327,7	330,3
45	331,3	330,3	329,3	330,0	325,2	328,2
50	329,5	328,3	327,3	328,0	322,9	326,0
55	327,7	326,5	325,4	326,2	320,8	323,9
60	326,0	324,7	323,5	324,2	318,7	322,0

Fuente: elaboración propia, mediciones experimentales.

Apéndice 7. **Mediciones de conductividad eléctrica en función del tiempo en la reacción de despolimerización del PET a 70 °C**

Tiempo (min)	Conductividad eléctrica de la solución (mS/cm)					
	2,000 mm		0,841 mm		0,420 mm	
	1	2	1	2	1	2
0	380,0	380,0	380,0	380,0	380,0	380,0
5	376,2	376,5	376,2	375,5	375,5	375,2
10	372,4	373,6	372,6	371,4	371,4	370,8
15	368,8	370,4	369,1	367,3	367,3	366,3
20	365,5	367,5	365,6	363,5	363,5	362,2
25	362,2	364,7	362,5	359,9	359,9	358,4
30	358,9	361,9	359,4	356,2	356,2	354,8
35	355,9	359,2	356,4	352,9	352,9	351,1
40	352,9	356,6	353,4	349,6	349,6	347,7
45	350,1	354,1	350,6	346,5	346,5	344,4
50	347,3	351,6	348,0	343,5	343,5	341,2
55	344,7	349,1	345,4	340,7	340,7	338,3
60	342,2	346,8	342,9	338,1	338,2	335,5

Fuente: elaboración propia, mediciones experimentales.

Apéndice 8. **Mediciones de conductividad eléctrica en función del tiempo en la reacción de despolimerización del PET a 90 °C**

Tiempo (min)	Conductividad eléctrica de la solución (mS/cm)					
	2,000 mm		0,841 mm		0,420 mm	
	1	2	1	2	1	2
0	392,0	392,0	392,0	392,0	392,0	392,0
5	388,5	388,4	387,5	387,4	387,7	387,8
10	385,1	384,7	383,4	382,9	383,6	383,8
15	381,8	381,3	379,5	378,8	379,7	379,9
20	378,6	378,0	375,7	374,8	376,0	376,3
25	375,7	374,8	372,0	371,0	372,5	372,7
30	372,7	371,9	368,6	367,4	369,0	369,4
35	369,9	368,9	365,3	364,0	365,8	366,2
40	367,3	366,1	362,1	360,7	362,6	363,1
45	364,6	363,5	359,0	357,5	359,6	360,1
50	362,1	360,8	356,1	354,4	356,7	357,2
55	359,7	358,2	353,3	351,6	353,8	354,4
60	357,0	355,7	350,4	348,6	351,1	351,6

Fuente: elaboración propia, mediciones experimentales.

## DATOS CALCULADOS

### Apéndice 10. Modelos lineales de la concentración de hidróxido de potasio en función de la conductividad eléctrica

Variable independiente: $\kappa_{sol}$ (mS/cm)		
Variable dependiente: $C^{KOH}$ (mol/l)		
$T$ (°C)	modelo	$R^2$
50	$C^{KOH} = 0,005724098\kappa_{sol} - 0,009031483$	0,9983
70	$C^{KOH} = 0,005284574\kappa_{sol} - 0,008901337$	0,9957
90	$C^{KOH} = 0,005043119\kappa_{sol} - 0,012562913$	0,9962

Fuente: elaboración propia.

### Apéndice 11. Determinación de la conversión fraccionaria de tereftalato de polietileno con un tamaño de partícula de 2,000 mm luego de una hora de reacción, mediante gravimetría

$\varnothing$ (2,000 mm)							
$T$ (°C)	Repetición	$m^{PF}$ (g)	$m^{PF+PET}$ (g)	$m^{PET}$ (g)	$X_g^{PET}$ (%)	$\overline{X}_g^{PET}$ (%)	$\delta X_g^{PET}$ (%)
50	1	1,238	13,006	11,768	21,547	22,177	0,891
	2	1,299	12,878	11,579	22,807		
70	1	1,397	11,808	10,411	30,593	28,963	2,305
	2	1,360	12,260	10,900	27,333		
90	1	1,059	11,085	10,026	33,160	33,773	0,867
	2	1,248	11,090	9,842	34,387		

Fuente: elaboración propia, ecuaciones 17 y 18.



Apéndice 12. **Determinación de la conversión fraccionaria de tereftalato de polietileno con un tamaño de partícula de 0,841 mm luego de una hora de reacción, mediante gravimetría**

<b>Ø (0,841 mm)</b>							
<b><math>T</math> (°C)</b>	<b>Repetición</b>	<b><math>m^{PF}</math> (g)</b>	<b><math>m^{PF+PET}</math> (g)</b>	<b><math>m^{PET}</math> (g)</b>	<b><math>X_g^{PET}</math> (%)</b>	<b><math>\overline{X_g^{PET}}</math> (%)</b>	<b><math>\delta\overline{X_g^{PET}}</math> (%)</b>
50	1	1,371	12,117	10,746	28,360	27,013	1,904
	2	1,273	12,423	11,150	25,667		
70	1	1,014	10,914	9,900	34,000	34,920	1,301
	2	1,293	10,917	9,624	35,840		
90	1	1,262	10,564	9,302	37,987	37,783	0,288
	2	1,073	10,436	9,363	37,580		

Fuente: elaboración propia, ecuaciones 17 y 18.

Apéndice 13. **Determinación de la conversión fraccionaria de tereftalato de polietileno con un tamaño de partícula de 0,420 mm luego de una hora de reacción, mediante gravimetría**

<b>Ø (0,420 mm)</b>							
<b><math>T</math> (°C)</b>	<b>Repetición</b>	<b><math>m^{PF}</math> (g)</b>	<b><math>m^{PF+PET}</math> (g)</b>	<b><math>m^{PET}</math> (g)</b>	<b><math>X_g^{PET}</math> (%)</b>	<b><math>\overline{X_g^{PET}}</math> (%)</b>	<b><math>\delta\overline{X_g^{PET}}</math> (%)</b>
50	1	1,171	12,543	11,372	24,187	23,633	0,783
	2	1,261	12,799	11,538	23,080		
70	1	1,148	11,661	10,513	29,913	31,993	2,942
	2	1,23	11,119	9,889	34,073		
90	1	1,246	10,564	9,314	37,907	38,967	1,499
	2	1,301	10,297	8,996	40,027		

Fuente: elaboración propia, ecuaciones 17 y 18.

**Apéndice 14. Determinación de la ley de velocidad a 50 °C y tamaño de partícula de 2,000 mm**

<b>Ø (2,000 mm), T (50 °C)</b>								
<b>Repetición 1</b>								
<i>t</i> (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/l)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET} / \Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	<i>y</i>
0	350,1	1,994975	0,001256	0,120696	0,804642	-0,000329	0,690632	3,270832
5	347,8	1,981810	0,004548	0,436943	2,912955	-0,000329	0,684011	3,285154
10	345,5	1,968645	0,007839	0,753190	5,021267	-0,000315	0,677345	3,255339
15	343,3	1,956052	0,010987	1,055687	7,037914	-0,000301	0,670928	3,223126
20	341,2	1,944031	0,013992	1,344434	8,962895	-0,000286	0,664764	3,188286
25	339,2	1,932583	0,016854	1,619431	10,796210	-0,000301	0,658857	3,250638
30	337,1	1,920562	0,019859	1,908179	12,721191	-0,000286	0,652618	3,216392
35	335,1	1,909114	0,022722	2,183176	14,554506	-0,000258	0,646639	3,125184
40	333,3	1,898811	0,025297	2,430673	16,204490	-0,000286	0,641228	3,243544
45	331,3	1,887362	0,028159	2,705671	18,037805	-0,000258	0,635180	3,152931
50	329,5	1,877059	0,030735	2,953168	19,687789	-0,000258	0,629706	3,166489
55	327,7	1,866756	0,033311	3,200666	21,337772	-0,000243	0,624202	3,123170
60	326,0	1,857025	0,035744	3,434414	22,896090			
<b>Repetición 2</b>								
<i>t</i> (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/l)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET} / \Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	<i>y</i>
0	350,1	1,994975	0,001256	0,120696	0,804642	-0,000329	0,690632	3,270832
5	347,8	1,981810	0,004548	0,436943	2,912955	-0,000358	0,684011	3,368536
10	345,3	1,967500	0,008125	0,780690	5,204599	-0,000329	0,676764	3,301079
15	343,0	1,954334	0,011416	1,096937	7,312911	-0,000329	0,670050	3,316073
20	340,7	1,941169	0,014708	1,413184	9,421224	-0,000301	0,663290	3,240441
25	338,6	1,929148	0,017713	1,701931	11,346204	-0,000315	0,657079	3,301282
30	336,4	1,916555	0,020861	2,004428	13,362851	-0,000301	0,650529	3,270102
35	334,3	1,904535	0,023866	2,293175	15,287832	-0,000286	0,644238	3,236291
40	332,3	1,893086	0,026728	2,568172	17,121147	-0,000286	0,638209	3,250877
45	330,3	1,881638	0,029590	2,843169	18,954463	-0,000286	0,632143	3,265790
50	328,3	1,870190	0,032452	3,118167	20,787778	-0,000258	0,626040	3,175683
55	326,5	1,859887	0,035028	3,365664	22,437761	-0,000258	0,620516	3,189716
60	324,7	1,849583	0,037604	3,613162	24,087745			
<b>Promedio</b>								
<i>t</i> (min)	$\overline{\kappa_{sol}}$ (mS/cm)	$\delta \kappa_{sol}$ (mS/cm)	$\overline{X^{PET}}$ (%)	$\delta X^{PET}$ (%)	$\overline{\ln C^{KOH}}$	$\delta \ln C^{KOH}$	$\overline{y}$	$\delta y$
0	350,10	0,100000	0,804642	0,000000	0,690632	0,000000	3,270832	0,000000
5	347,80	0,100000	2,912955	0,000000	0,684011	0,000000	3,326845	0,058960
10	345,40	0,241421	5,112933	0,129635	0,677054	0,000411	3,278209	0,032343
15	343,15	0,312132	7,175412	0,194452	0,670489	0,000621	3,269600	0,065723
20	340,95	0,453553	9,192059	0,324087	0,664027	0,001042	3,214363	0,036879
25	338,90	0,524264	11,071207	0,388905	0,657968	0,001258	3,275960	0,035810
30	336,75	0,594975	13,042021	0,453722	0,651574	0,001477	3,243247	0,037978
35	334,70	0,665685	14,921169	0,518540	0,645438	0,001698	3,180738	0,078564
40	332,80	0,807107	16,662819	0,648175	0,639718	0,002135	3,247211	0,005185
45	330,80	0,807107	18,496134	0,648175	0,633662	0,002148	3,209361	0,079803
50	328,90	0,948528	20,237783	0,777810	0,627873	0,002592	3,171086	0,006501
55	327,10	0,948528	21,887767	0,777810	0,622359	0,002607	3,156443	0,047056
60	325,35	1,019239	23,491918	0,842627				

Fuente: elaboración propia, ecuaciones 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27 y 28.

Apéndice 15. Determinación de la ley de velocidad a 50 °C y tamaño de partícula de 0,841 mm

Ø (0,841 mm), T (50 °C)								
Repetición 1								
t (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/l)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET} / \Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	y
0	350,1	1,994975	0,001256	0,120696	0,804642	-0,000372	0,690632	5,126056
5	347,5	1,980093	0,004977	0,478193	3,187952	-0,000358	0,683144	5,103048
10	345,0	1,965782	0,008554	0,821939	5,479596	-0,000358	0,675890	5,119019
15	342,5	1,951472	0,012132	1,165686	7,771240	-0,000329	0,668584	5,051999
20	340,2	1,938307	0,015423	1,481933	9,879552	-0,000329	0,661815	5,067416
25	337,9	1,925141	0,018715	1,798180	11,987865	-0,000329	0,654999	5,083198
30	335,6	1,911976	0,022006	2,114427	14,096177	-0,000315	0,648137	5,054910
35	333,4	1,899383	0,025154	2,416924	16,112824	-0,000272	0,641529	4,924144
40	331,5	1,888507	0,027873	2,678171	17,854473	-0,000315	0,635787	5,084734
45	329,3	1,875914	0,031021	2,980668	19,871120	-0,000286	0,629096	5,005995
50	327,3	1,864466	0,033884	3,255665	21,704435	-0,000272	0,622975	4,970132
55	325,4	1,853590	0,036602	3,516913	23,446085	-0,000272	0,617124	4,985129
60	323,5	1,842714	0,039321	3,778160	25,187734			
Repetición 2								
t (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/l)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET} / \Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	y
0	350,1	1,994975	0,001256	0,120696	0,804642	-0,000358	0,690632	5,086835
5	347,6	1,980665	0,004834	0,464443	3,096286	-0,000343	0,683433	5,061595
10	345,2	1,966927	0,008268	0,794440	5,296264	-0,000343	0,676473	5,076905
15	342,8	1,953189	0,011703	1,124436	7,496243	-0,000329	0,669464	5,050015
20	340,5	1,940024	0,014994	1,440683	9,604555	-0,000301	0,662700	4,974413
25	338,4	1,928003	0,017999	1,729430	11,529536	-0,000329	0,656485	5,079735
30	336,1	1,914838	0,021290	2,045677	13,637848	-0,000286	0,649633	4,956053
35	334,1	1,903390	0,024153	2,320675	15,471164	-0,000301	0,643636	5,019147
40	332,0	1,891369	0,027158	2,609422	17,396145	-0,000286	0,637301	4,985715
45	330,0	1,879921	0,030020	2,884419	19,229460	-0,000286	0,631230	5,000677
50	328,0	1,868473	0,032882	3,159416	21,062775	-0,000258	0,625121	4,910623
55	326,2	1,858169	0,035458	3,406914	22,712759	-0,000286	0,619592	5,030066
60	324,2	1,846721	0,038320	3,681911	24,546074			
Promedio								
t (min)	$\overline{\kappa_{sol}}$ (mS/cm)	$\delta \kappa_{sol}$ (mS/cm)	$\overline{X^{PET}}$ (%)	$\delta \overline{X^{PET}}$ (%)	$\overline{\ln C^{KOH}}$	$\delta \ln C^{KOH}$	$\overline{y}$	$\delta y$
0	350,10	0,100000	0,804642	0,000000	0,690632	0,000000	5,106445	0,027733
5	347,55	0,170711	3,142119	0,064817	0,683288	0,000204	5,082322	0,029312
10	345,10	0,241421	5,387930	0,129635	0,676181	0,000412	5,097962	0,029779
15	342,65	0,312132	7,633741	0,194452	0,669024	0,000622	5,051007	0,001403
20	340,35	0,312132	9,742054	0,194452	0,662258	0,000626	5,020915	0,065763
25	338,15	0,453553	11,758700	0,324087	0,655742	0,001050	5,081466	0,002448
30	335,85	0,453553	13,867013	0,324087	0,648885	0,001058	5,005481	0,069903
35	333,75	0,594975	15,791994	0,453722	0,642583	0,001490	4,971645	0,067178
40	331,75	0,453553	17,625309	0,324087	0,636544	0,001071	5,035224	0,070017
45	329,65	0,594975	19,550290	0,453722	0,630163	0,001509	5,003336	0,003760
50	327,65	0,594975	21,383605	0,453722	0,624048	0,001518	4,940377	0,042079
55	325,80	0,665685	23,079422	0,518540	0,618358	0,001745	5,007598	0,031776
60	323,85	0,594975	24,866904	0,453722				

Fuente: elaboración propia, ecuaciones 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27 y 28.

**Apéndice 16. Determinación de la ley de velocidad a 50 °C y tamaño de partícula de 0,420 mm**

<b>Ø (0,420 mm), T (50 °C)</b>								
<b>Repetición 1</b>								
<i>t</i> (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/l)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET} / \Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	<i>y</i>
0	350,1	1,994975	0,001256	0,120696	0,804642	-0,000444	0,690632	6,690620
5	347,0	1,977231	0,005692	0,546942	3,646281	-0,000444	0,681697	6,709997
10	343,9	1,959486	0,010129	0,973188	6,487919	-0,000415	0,672682	6,663263
15	341,0	1,942886	0,014278	1,371934	9,146226	-0,000401	0,664175	6,647397
20	338,2	1,926859	0,018285	1,756930	11,712868	-0,000401	0,655891	6,666502
25	335,4	1,910831	0,022292	2,141926	14,279509	-0,000401	0,647538	6,686170
30	332,6	1,894804	0,026299	2,526923	16,846150	-0,000358	0,639115	6,593108
35	330,1	1,880493	0,029877	2,870669	19,137794	-0,000343	0,631534	6,570917
40	327,7	1,866756	0,033311	3,200666	21,337772	-0,000358	0,624202	6,630128
45	325,2	1,852445	0,036889	3,544412	23,629416	-0,000329	0,616507	6,566456
50	322,9	1,839280	0,040180	3,860659	25,737729	-0,000301	0,609374	6,494148
55	320,8	1,827259	0,043185	4,149406	27,662710	-0,000301	0,602817	6,511656
60	318,7	1,815239	0,046190	4,438154	29,587691			
<b>Repetición 2</b>								
<i>t</i> (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/l)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET} / \Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	<i>y</i>
0	350,1	1,994975	0,001256	0,120696	0,804642	-0,000401	0,690632	6,588838
5	347,3	1,978948	0,005263	0,505693	3,371283	-0,000372	0,682565	6,532206
10	344,7	1,964065	0,008984	0,863189	5,754593	-0,000386	0,675016	6,586596
15	342,0	1,948610	0,012847	1,234435	8,229569	-0,000358	0,667116	6,527376
20	339,5	1,934300	0,016425	1,578182	10,521213	-0,000329	0,659745	6,460854
25	337,2	1,921135	0,019716	1,894429	12,629525	-0,000343	0,652916	6,519309
30	334,8	1,907397	0,023151	2,224426	14,829503	-0,000343	0,645739	6,536311
35	332,4	1,893659	0,026585	2,554422	17,029482	-0,000301	0,638511	6,420226
40	330,3	1,881638	0,029590	2,843169	18,954463	-0,000301	0,632143	6,435875
45	328,2	1,869618	0,032596	3,131917	20,879444	-0,000315	0,625734	6,498421
50	326,0	1,857025	0,035744	3,434414	22,896090	-0,000301	0,618976	6,469114
55	323,9	1,845004	0,038749	3,723161	24,821071	-0,000272	0,612481	6,385885
60	322,0	1,834128	0,041468	3,984408	26,562721			
<b>Promedio</b>								
<i>t</i> (min)	$\overline{\kappa_{sol}}$ (mS/cm)	$\overline{\delta\kappa_{sol}}$ (mS/cm)	$\overline{X^{PET}}$ (%)	$\overline{\delta X^{PET}}$ (%)	$\overline{\ln C^{KOH}}$	$\overline{\delta \ln C^{KOH}}$	$\overline{y}$	$\overline{\delta y}$
0	350,10	0,100000	0,804642	0,000000	0,690632	0,000000	6,639729	0,071971
5	347,15	0,312132	3,508782	0,194452	0,682131	0,000614	6,621102	0,125717
10	344,30	0,665685	6,121256	0,518540	0,673849	0,001651	6,624929	0,054211
15	341,50	0,807107	8,687897	0,648175	0,665645	0,002080	6,587387	0,084868
20	338,85	1,019239	11,117040	0,842627	0,657818	0,002726	6,563678	0,145415
25	336,30	1,372792	13,454517	1,166715	0,650227	0,003803	6,602740	0,117989
30	333,70	1,655635	15,837827	1,425985	0,642427	0,004684	6,564709	0,040162
35	331,25	1,726346	18,083638	1,490802	0,635023	0,004933	6,495571	0,106554
40	329,00	1,938478	20,146117	1,685254	0,628172	0,005615	6,533002	0,137357
45	326,70	2,221320	22,254430	1,944524	0,621120	0,006525	6,532439	0,048108
50	324,45	2,292031	24,316910	2,009342	0,614175	0,006789	6,481631	0,017702
55	322,35	2,292031	26,241891	2,009342	0,607649	0,006834	6,448771	0,088933
60	320,35	2,433452	28,075206	2,138977				

Fuente: elaboración propia, ecuaciones 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27 y 28.

Apéndice 17. Determinación de la ley de velocidad a 70 °C y tamaño de partícula de 2,000 mm

Ø (2,000 mm), T (70 °C)								
Repetición 1								
t (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/l)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET}/\Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	y
0	380,0	1,999237	0,000191	0,018330	0,122202	-0,000502	0,692766	3,688460
5	376,2	1,979156	0,005211	0,500705	3,338036	-0,000502	0,682670	3,710278
10	372,4	1,959074	0,010231	0,983081	6,553870	-0,000476	0,672472	3,678768
15	368,8	1,940050	0,014988	1,440068	9,600450	-0,000436	0,662714	3,613853
20	365,5	1,922611	0,019347	1,858972	12,393148	-0,000436	0,653684	3,634773
25	362,2	1,905171	0,023707	2,277877	15,185846	-0,000436	0,644572	3,656371
30	358,9	1,887732	0,028067	2,696782	17,978545	-0,000396	0,635376	3,583382
35	355,9	1,871879	0,032030	3,077604	20,517361	-0,000396	0,626943	3,604344
40	352,9	1,856025	0,035994	3,458427	23,056178	-0,000370	0,618437	3,556993
45	350,1	1,841228	0,039693	3,813861	25,425740	-0,000370	0,610433	3,577846
50	347,3	1,826431	0,043392	4,169295	27,795302	-0,000343	0,602364	3,525265
55	344,7	1,812691	0,046827	4,499341	29,995609	-0,000330	0,594813	3,506676
60	342,2	1,799480	0,050130	4,816693	32,111290			
Repetición 2								
t (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/l)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET}/\Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	y
0	380,0	1,999237	0,000191	0,018330	0,122202	-0,000462	0,692766	3,606222
5	376,5	1,980741	0,004815	0,462623	3,084154	-0,000383	0,683471	3,438239
10	373,6	1,965416	0,008646	0,830752	5,538344	-0,000423	0,675704	3,553779
15	370,4	1,948505	0,012874	1,236962	8,246415	-0,000383	0,667062	3,474730
20	367,5	1,933180	0,016705	1,605091	10,700604	-0,000370	0,659166	3,457713
25	364,7	1,918383	0,020404	1,960525	13,070166	-0,000370	0,651483	3,475642
30	361,9	1,903586	0,024103	2,315959	15,439728	-0,000357	0,643740	3,457699
35	359,2	1,889318	0,027671	2,658699	17,724663	-0,000343	0,636216	3,438221
40	356,6	1,875578	0,031106	2,988746	19,924971	-0,000330	0,628917	3,417072
45	354,1	1,862366	0,034408	3,306098	22,040651	-0,000330	0,621848	3,434923
50	351,6	1,849155	0,037711	3,623450	24,156331	-0,000330	0,614729	3,453265
55	349,1	1,835944	0,041014	3,940802	26,272012	-0,000304	0,607559	3,388745
60	346,8	1,823789	0,044053	4,232766	28,218438			
Promedio								
t (min)	$\overline{\kappa_{sol}}$ (mS/cm)	$\overline{\delta\kappa_{sol}}$ (mS/cm)	$\overline{X^{PET}}$ (%)	$\overline{\delta X^{PET}}$ (%)	$\overline{\ln C^{KOH}}$	$\overline{\delta \ln C^{KOH}}$	$\overline{y}$	$\overline{\delta y}$
0	380,00	0,100000	0,122202	0,000000	0,692766	0,000000	3,647341	0,058151
5	376,35	0,312132	3,211095	0,179521	0,683071	0,000566	3,574259	0,192361
10	373,00	0,948528	6,046107	0,718086	0,674088	0,002285	3,616273	0,088381
15	369,60	1,231371	8,923432	0,957448	0,664888	0,003075	3,544292	0,098375
20	366,50	1,514214	11,546876	1,196810	0,656425	0,003877	3,546243	0,125200
25	363,45	1,867767	14,128006	1,496012	0,648027	0,004887	3,566007	0,127795
30	360,40	2,221320	16,709136	1,795214	0,639558	0,005914	3,520541	0,088871
35	357,55	2,433452	19,121012	1,974736	0,631579	0,006557	3,521282	0,117466
40	354,75	2,716295	21,490574	2,214098	0,623677	0,007410	3,487032	0,098939
45	352,10	2,928427	23,733195	2,393619	0,616140	0,008072	3,506385	0,101062
50	349,45	3,140559	25,975817	2,573141	0,608546	0,008743	3,489265	0,050912
55	346,90	3,211270	28,133811	2,632981	0,601186	0,009013	3,447710	0,083390
60	344,50	3,352691	30,164864	2,752662				

Fuente: elaboración propia, ecuaciones 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27 y 28.

**Apéndice 18. Determinación de la ley de velocidad a 70 °C y tamaño de partícula de 0,841 mm**

<b>Ø (0,841 mm), T (70 °C)</b>								
<b>Repetición 1</b>								
<i>t</i> (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/L)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET}/\Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	<i>y</i>
0	380,0	1,999237	0,000191	0,018330	0,122202	-0,000502	0,692766	5,421081
5	376,2	1,979156	0,005211	0,500705	3,338036	-0,000476	0,682670	5,388833
10	372,6	1,960131	0,009967	0,957692	6,384616	-0,000462	0,673011	5,382012
15	369,1	1,941635	0,014591	1,401985	9,346568	-0,000462	0,663530	5,403446
20	365,6	1,923139	0,019215	1,846278	12,308521	-0,000410	0,653959	5,304231
25	362,5	1,906757	0,023311	2,239795	14,931965	-0,000410	0,645404	5,324480
30	359,4	1,890375	0,027406	2,633311	17,555408	-0,000396	0,636775	5,312573
35	356,4	1,874521	0,031370	3,014134	20,094225	-0,000396	0,628353	5,333426
40	353,4	1,858667	0,035333	3,394956	22,633042	-0,000370	0,619860	5,285958
45	350,6	1,843870	0,039032	3,750391	25,002604	-0,000343	0,611867	5,232588
50	348,0	1,830131	0,042467	4,080437	27,202911	-0,000343	0,604387	5,252440
55	345,4	1,816391	0,045902	4,410483	29,403219	-0,000330	0,596851	5,233680
60	342,9	1,803179	0,049205	4,727835	31,518899			
<b>Repetición 2</b>								
<i>t</i> (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/L)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET}/\Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	<i>y</i>
0	380,0	1,999237	0,000191	0,018330	0,122202	-0,000595	0,692766	5,590158
5	375,5	1,975456	0,006136	0,589564	3,930426	-0,000542	0,680799	5,522984
10	371,4	1,953790	0,011553	1,110021	7,400142	-0,000542	0,669771	5,547507
15	367,3	1,932123	0,016969	1,630479	10,869858	-0,000502	0,658619	5,496981
20	363,5	1,912041	0,021990	2,112854	14,085693	-0,000476	0,648171	5,467412
25	359,9	1,893017	0,026746	2,569841	17,132272	-0,000489	0,638172	5,518881
30	356,2	1,873464	0,031634	3,039522	20,263479	-0,000436	0,627789	5,430149
35	352,9	1,856025	0,035994	3,458427	23,056178	-0,000436	0,618437	5,453917
40	349,6	1,838586	0,040354	3,877331	25,848876	-0,000410	0,608997	5,416044
45	346,5	1,822204	0,044449	4,270848	28,472320	-0,000396	0,600047	5,407268
50	343,5	1,806350	0,048413	4,651670	31,011136	-0,000370	0,591308	5,362368
55	340,7	1,791553	0,052112	5,007105	33,380698	-0,000330	0,583083	5,272340
60	338,2	1,778342	0,055415	5,324457	35,496379			
<b>Promedio</b>								
<i>t</i> (min)	$\overline{\kappa_{sol}}$ (mS/cm)	$\overline{\delta\kappa_{sol}}$ (mS/cm)	$\overline{X^{PET}}$ (%)	$\overline{\delta X^{PET}}$ (%)	$\overline{\ln C^{KOH}}$	$\overline{\delta \ln C^{KOH}}$	$\overline{y}$	$\overline{\delta y}$
0	380,00	0,100000	0,122202	0,000000	0,692766	0,000000	5,505620	0,119555
5	375,85	0,594975	3,634231	0,418883	0,681735	0,001323	5,455908	0,094859
10	372,00	0,948528	6,892379	0,718086	0,671391	0,002291	5,464760	0,117023
15	368,20	1,372792	10,108213	1,077129	0,661075	0,003473	5,450214	0,066140
20	364,55	1,584924	13,197107	1,256650	0,651065	0,004092	5,385822	0,115387
25	361,20	1,938478	16,032119	1,555852	0,641788	0,005114	5,421680	0,137462
30	357,80	2,362742	18,909444	1,914895	0,632282	0,006354	5,371361	0,083139
35	354,65	2,574874	21,575201	2,094417	0,623395	0,007012	5,393672	0,085201
40	351,50	2,787006	24,240959	2,273938	0,614428	0,007681	5,351001	0,091985
45	348,55	2,999138	26,737462	2,453460	0,605957	0,008358	5,319928	0,123517
50	345,75	3,281981	29,107024	2,692822	0,597848	0,009248	5,307404	0,077731
55	343,05	3,423402	31,391959	2,812503	0,589967	0,009736	5,253010	0,027337
60	340,55	3,423402	33,507639	2,812503				

Fuente: elaboración propia, ecuaciones 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27 y 28.

Apéndice 19. Determinación de la ley de velocidad a 70 °C y tamaño de partícula de 0,420 mm

Ø (0,420 mm), T (70 °C)								
Repetición 1								
t (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/L)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET}/\Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	y
0	380,0	1,999237	0,000191	0,018330	0,122202	-0,000595	0,692766	6,978832
5	375,5	1,975456	0,006136	0,589564	3,930426	-0,000542	0,680799	6,911658
10	371,4	1,953790	0,011553	1,110021	7,400142	-0,000542	0,669771	6,936181
15	367,3	1,932123	0,016969	1,630479	10,869858	-0,000502	0,658619	6,885655
20	363,5	1,912041	0,021990	2,112854	14,085693	-0,000476	0,648171	6,856086
25	359,9	1,893017	0,026746	2,569841	17,132272	-0,000489	0,638172	6,907555
30	356,2	1,873464	0,031634	3,039522	20,263479	-0,000436	0,627789	6,818823
35	352,9	1,856025	0,035994	3,458427	23,056178	-0,000436	0,618437	6,842591
40	349,6	1,838586	0,040354	3,877331	25,848876	-0,000410	0,608997	6,804718
45	346,5	1,822204	0,044449	4,270848	28,472320	-0,000396	0,600047	6,795942
50	343,5	1,806350	0,048413	4,651670	31,011136	-0,000370	0,591308	6,751042
55	340,7	1,791553	0,052112	5,007105	33,380698	-0,000330	0,583083	6,661014
60	338,2	1,778342	0,055415	5,324457	35,496379			
Repetición 2								
t (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/L)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET}/\Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	y
0	380,0	1,999237	0,000191	0,018330	0,122202	-0,000634	0,692766	7,043370
5	375,2	1,973871	0,006532	0,627646	4,184308	-0,000581	0,679997	6,984039
10	370,8	1,950619	0,012345	1,186186	7,907906	-0,000595	0,668147	7,032937
15	366,3	1,926838	0,018290	1,757420	11,716130	-0,000542	0,655880	6,968001
20	362,2	1,905171	0,023707	2,277877	15,185846	-0,000502	0,644572	6,918745
25	358,4	1,885090	0,028727	2,760252	18,401681	-0,000476	0,633976	6,890447
30	354,8	1,866066	0,033484	3,217239	21,448260	-0,000489	0,623832	6,943214
35	351,1	1,846513	0,038372	3,686920	24,579468	-0,000449	0,613299	6,885775
40	347,7	1,828545	0,042864	4,118519	27,456793	-0,000436	0,603521	6,881854
45	344,4	1,811106	0,047223	4,537424	30,249491	-0,000423	0,593938	6,877254
50	341,2	1,794195	0,051451	4,943634	32,957562	-0,000383	0,584557	6,805213
55	338,3	1,778870	0,055282	5,311763	35,411751	-0,000370	0,575978	6,794984
60	335,5	1,764073	0,058982	5,667197	37,781313			
Promedio								
t (min)	$\overline{\kappa_{sol}}$ (mS/cm)	$\delta\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$\overline{X^{PET}}$ (%)	$\delta\overline{X^{PET}}$ (%)	$\overline{\ln C^{KOH}}$	$\delta \ln C^{KOH}$	$\overline{y}$	$\delta y$
0	380,00	0,100000	0,122202	0,000000	0,692766	0,000000	7,011101	0,045636
5	375,35	0,312132	4,057367	0,179521	0,680398	0,000568	6,947849	0,051182
10	371,10	0,524264	7,654024	0,359043	0,668959	0,001148	6,984559	0,068417
15	366,80	0,807107	11,292994	0,598405	0,657250	0,001937	6,926828	0,058227
20	362,85	1,019239	14,635769	0,777926	0,646372	0,002545	6,887416	0,044307
25	359,15	1,160660	17,766977	0,897607	0,636074	0,002967	6,899001	0,012097
30	355,50	1,089949	20,855870	0,837767	0,625811	0,002798	6,881019	0,087957
35	352,00	1,372792	23,817823	1,077129	0,615868	0,003633	6,864183	0,030535
40	348,65	1,443503	26,652834	1,136969	0,606259	0,003872	6,843286	0,054543
45	345,45	1,584924	29,360905	1,256650	0,596992	0,004320	6,836598	0,057496
50	342,35	1,726346	31,984349	1,376331	0,587932	0,004774	6,778127	0,038305
55	339,50	1,797056	34,396225	1,436172	0,579531	0,005024	6,727999	0,094731
60	336,85	2,009188	36,638846	1,615693				

Fuente: elaboración propia, ecuaciones 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27 y 28.

**Apéndice 20. Determinación de la ley de velocidad a 90 °C y tamaño de partícula de 2,000 mm**

<b>Ø (2,000 mm), T (90 °C)</b>								
<b>Repetición 1</b>								
<i>t</i> (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/L)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET}/\Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	<i>y</i>
0	392,0	1,964340	0,008915	0,856599	5,710659	-0,000441	0,675156	3,597841
5	388,5	1,946689	0,013328	1,280592	8,537278	-0,000429	0,666130	3,589144
10	385,1	1,929542	0,017614	1,692470	11,283136	-0,000416	0,657283	3,579612
15	381,8	1,912900	0,021775	2,092235	13,948234	-0,000403	0,648620	3,569174
20	378,6	1,896762	0,025810	2,479886	16,532572	-0,000366	0,640148	3,491063
25	375,7	1,882137	0,029466	2,831194	18,874628	-0,000378	0,632408	3,543938
30	372,7	1,867007	0,033248	3,194617	21,297444	-0,000353	0,624337	3,495159
35	369,9	1,852887	0,036778	3,533811	23,558739	-0,000328	0,616745	3,440486
40	367,3	1,839775	0,040056	3,848777	25,658513	-0,000340	0,609643	3,496795
45	364,6	1,826158	0,043460	4,175857	27,839048	-0,000315	0,602214	3,439681
50	362,1	1,813550	0,046612	4,478709	29,858062	-0,000303	0,595286	3,417778
55	359,7	1,801447	0,049638	4,769447	31,796315	-0,000340	0,588590	3,554242
60	357,0	1,787830	0,053042	5,096527	33,976849			
<b>Repetición 2</b>								
<i>t</i> (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/L)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET}/\Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	<i>y</i>
0	392,0	1,964340	0,008915	0,856599	5,710659	-0,000454	0,675156	3,626011
5	388,4	1,946184	0,013454	1,292706	8,618038	-0,000466	0,665871	3,674290
10	384,7	1,927525	0,018119	1,740927	11,606179	-0,000429	0,656237	3,611897
15	381,3	1,910378	0,022405	2,152806	14,352037	-0,000416	0,647301	3,603082
20	378,0	1,893736	0,026566	2,552570	17,017135	-0,000403	0,638552	3,593384
25	374,8	1,877598	0,030601	2,940221	19,601472	-0,000366	0,629993	3,516037
30	371,9	1,862973	0,034257	3,291529	21,943528	-0,000378	0,622174	3,569647
35	368,9	1,847844	0,038039	3,654952	24,366345	-0,000353	0,614019	3,521675
40	366,1	1,833723	0,041569	3,994146	26,627640	-0,000328	0,606348	3,467803
45	363,5	1,820611	0,044847	4,309112	28,727414	-0,000340	0,599172	3,524900
50	360,8	1,806994	0,048251	4,636192	30,907949	-0,000328	0,591665	3,507875
55	358,2	1,793882	0,051529	4,951158	33,007723	-0,000315	0,584382	3,489229
60	355,7	1,781274	0,054681	5,254010	35,026736			
<b>Promedio</b>								
<i>t</i> (min)	$\overline{\kappa_{sol}}$ (mS/cm)	$\overline{\delta\kappa_{sol}}$ (mS/cm)	$\overline{X^{PET}}$ (%)	$\overline{\delta X^{PET}}$ (%)	$\overline{\ln C^{KOH}}$	$\overline{\delta \ln C^{KOH}}$	$\overline{y}$	$\overline{\delta y}$
0	392,00	0,100000	5,710659	0,000000	0,675156	0,000000	3,611926	0,019920
5	388,45	0,170711	8,577658	0,057106	0,666000	0,000183	3,631717	0,060208
10	384,90	0,382843	11,444657	0,228425	0,656760	0,000740	3,595755	0,022829
15	381,55	0,453553	14,150136	0,285532	0,647961	0,000933	3,586128	0,023976
20	378,30	0,524264	16,774853	0,342638	0,639350	0,001129	3,542224	0,072352
25	375,25	0,736396	19,238050	0,513957	0,631200	0,001707	3,529987	0,019729
30	372,30	0,665685	21,620486	0,456851	0,623255	0,001530	3,532403	0,052671
35	369,40	0,807107	23,962542	0,571063	0,615382	0,001927	3,481080	0,057409
40	366,70	0,948528	26,143077	0,685276	0,607996	0,002330	3,482299	0,020501
45	364,05	0,877817	28,283231	0,628170	0,600693	0,002151	3,482291	0,060259
50	361,45	1,019239	30,383005	0,742382	0,593476	0,002561	3,462826	0,063708
55	358,95	1,160660	32,402019	0,856595	0,586486	0,002976	3,521736	0,045972
60	356,35	1,019239	34,501793	0,742382				

Fuente: elaboración propia, ecuaciones 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27 y 28.



Apéndice 21. Determinación de la ley de velocidad a 90 °C y tamaño de partícula de 0,841 mm

Ø (0,841 mm), T (90 °C)								
Repetición 1								
<i>t</i> (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/l)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET}/\Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	<i>y</i>
0	392,0	1,964340	0,008915	0,856599	5,710659	-0,000567	0,675156	5,581777
5	387,5	1,941646	0,014589	1,401733	9,344883	-0,000517	0,663536	5,514890
10	383,4	1,920969	0,019758	1,898410	12,656066	-0,000492	0,652830	5,489685
15	379,5	1,901301	0,024675	2,370859	15,805727	-0,000479	0,642538	5,488194
20	375,7	1,882137	0,029466	2,831194	18,874628	-0,000466	0,632408	5,486280
25	372,0	1,863477	0,034131	3,279415	21,862768	-0,000429	0,622444	5,426742
30	368,6	1,846331	0,038417	3,691294	24,608626	-0,000416	0,613200	5,420739
35	365,3	1,829688	0,042578	4,091059	27,273724	-0,000403	0,604146	5,413960
40	362,1	1,813550	0,046612	4,478709	29,858062	-0,000391	0,595286	5,406333
45	359,0	1,797917	0,050521	4,854246	32,361638	-0,000366	0,586629	5,363872
50	356,1	1,783292	0,054177	5,205554	34,703694	-0,000353	0,578461	5,352274
55	353,3	1,769171	0,057707	5,544748	36,964990	-0,000366	0,570511	5,410862
60	350,4	1,754546	0,061364	5,896057	39,307045			
Repetición 2								
<i>t</i> (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/l)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET}/\Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	<i>y</i>
0	392,0	1,964340	0,008915	0,856599	5,710659	-0,000580	0,675156	5,603756
5	387,4	1,941141	0,014715	1,413847	9,425644	-0,000567	0,663276	5,608575
10	382,9	1,918447	0,020388	1,958980	13,059868	-0,000517	0,651516	5,542785
15	378,8	1,897770	0,025557	2,455658	16,371051	-0,000504	0,640680	5,543979
20	374,8	1,877598	0,030601	2,940221	19,601472	-0,000479	0,629993	5,518948
25	371,0	1,858434	0,035391	3,400556	22,670373	-0,000454	0,619734	5,490827
30	367,4	1,840279	0,039930	3,836663	25,577753	-0,000429	0,609917	5,459217
35	364,0	1,823132	0,044217	4,248542	28,323611	-0,000416	0,600556	5,454426
40	360,7	1,806490	0,048378	4,648306	30,988709	-0,000403	0,591386	5,448915
45	357,5	1,790352	0,052412	5,035957	33,573047	-0,000391	0,582412	5,442611
50	354,4	1,774718	0,056320	5,411494	36,076624	-0,000353	0,573642	5,366441
55	351,6	1,760598	0,059851	5,750688	38,337919	-0,000378	0,565653	5,459444
60	348,6	1,745468	0,063633	6,114110	40,760735			
Promedio								
<i>t</i> (min)	$\overline{\kappa_{sol}}$ (mS/cm)	$\delta\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$\overline{X^{PET}}$ (%)	$\delta\overline{X^{PET}}$ (%)	$\overline{\ln C^{KOH}}$	$\delta \ln C^{KOH}$	$\overline{y}$	$\delta y$
0	392,00	0,100000	5,710659	0,000000	0,675156	0,000000	5,592766	0,015541
5	387,45	0,170711	9,385264	0,057106	0,663406	0,000184	5,561732	0,066245
10	383,15	0,453553	12,857967	0,285532	0,652173	0,000929	5,516235	0,037547
15	379,15	0,594975	16,088389	0,399744	0,641609	0,001314	5,516087	0,039446
20	375,25	0,736396	19,238050	0,513957	0,631200	0,001707	5,502614	0,023100
25	371,50	0,807107	22,266570	0,571063	0,621089	0,001916	5,458785	0,045315
30	368,00	0,948528	25,093189	0,685276	0,611559	0,002321	5,439978	0,027208
35	364,65	1,019239	27,798668	0,742382	0,602351	0,002538	5,434193	0,028614
40	361,40	1,089949	30,423385	0,799489	0,593336	0,002758	5,427624	0,030110
45	358,25	1,160660	32,967343	0,856595	0,584520	0,002981	5,403242	0,055677
50	355,25	1,302082	35,390159	0,970808	0,576051	0,003408	5,359357	0,010018
55	352,45	1,302082	37,651454	0,970808	0,568082	0,003435	5,435153	0,034353
60	349,50	1,372792	40,033890	1,027914				

Fuente: elaboración propia, ecuaciones 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27 y 28.

**Apéndice 22. Determinación de la ley de velocidad a 90 °C y tamaño de partícula de 0,420 mm**

<b>Ø (0,420 mm), T (90 °C)</b>								
<b>Repetición 1</b>								
<i>t</i> (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/L)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET} / \Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	<i>y</i>
0	392,0	1,964340	0,008915	0,856599	5,710659	-0,000567	0,675156	6,970451
5	387,5	1,941646	0,014589	1,401733	9,344883	-0,000517	0,663536	6,903564
10	383,4	1,920969	0,019758	1,898410	12,656066	-0,000492	0,652830	6,878359
15	379,5	1,901301	0,024675	2,370859	15,805727	-0,000479	0,642538	6,876868
20	375,7	1,882137	0,029466	2,831194	18,874628	-0,000466	0,632408	6,874954
25	372,0	1,863477	0,034131	3,279415	21,862768	-0,000429	0,622444	6,815416
30	368,6	1,846331	0,038417	3,691294	24,608626	-0,000416	0,613200	6,809412
35	365,3	1,829688	0,042578	4,091059	27,273724	-0,000403	0,604146	6,802634
40	362,1	1,813550	0,046612	4,478709	29,858062	-0,000391	0,595286	6,795007
45	359,0	1,797917	0,050521	4,854246	32,361638	-0,000366	0,586629	6,752546
50	356,1	1,783292	0,054177	5,205554	34,703694	-0,000353	0,578461	6,740948
55	353,3	1,769171	0,057707	5,544748	36,964990	-0,000366	0,570511	6,799536
60	350,4	1,754546	0,061364	5,896057	39,307045			
<b>Repetición 2</b>								
<i>t</i> (min)	$\kappa_{sol}$ (mS/cm)	$C^{KOH}$ (mol/L)	$N_c^{KOH}$ (mol)	$m_c^{PET}$ (g)	$X^{PET}$ (%)	$\Delta N^{PET} / \Delta t$ (mol/min)	$\ln C^{KOH}$	<i>y</i>
0	392,0	1,964340	0,008915	0,856599	5,710659	-0,000580	0,675156	6,992429
5	387,4	1,941141	0,014715	1,413847	9,425644	-0,000567	0,663276	6,997249
10	382,9	1,918447	0,020388	1,958980	13,059868	-0,000517	0,651516	6,931459
15	378,8	1,897770	0,025557	2,455658	16,371051	-0,000504	0,640680	6,932653
20	374,8	1,877598	0,030601	2,940221	19,601472	-0,000479	0,629993	6,907622
25	371,0	1,858434	0,035391	3,400556	22,670373	-0,000454	0,619734	6,879501
30	367,4	1,840279	0,039930	3,836663	25,577753	-0,000429	0,609917	6,847891
35	364,0	1,823132	0,044217	4,248542	28,323611	-0,000416	0,600556	6,843100
40	360,7	1,806490	0,048378	4,648306	30,988709	-0,000403	0,591386	6,837589
45	357,5	1,790352	0,052412	5,035957	33,573047	-0,000391	0,582412	6,831285
50	354,4	1,774718	0,056320	5,411494	36,076624	-0,000353	0,573642	6,755115
55	351,6	1,760598	0,059851	5,750688	38,337919	-0,000378	0,565653	6,848118
60	348,6	1,745468	0,063633	6,114110	40,760735			
<b>Promedio</b>								
<i>t</i> (min)	$\overline{\kappa_{sol}}$ (mS/cm)	$\overline{\delta \kappa_{sol}}$ (mS/cm)	$\overline{X^{PET}}$ (%)	$\overline{\delta X^{PET}}$ (%)	$\overline{\ln C^{KOH}}$	$\overline{\delta \ln C^{KOH}}$	$\overline{y}$	$\overline{\delta y}$
0	392,00	0,100000	5,710659	0,000000	0,675156	0,000000	6,913223	0,016639
5	387,75	0,170711	9,142982	0,057106	0,664185	0,000184	6,889735	0,017879
10	383,70	0,241421	12,413784	0,114213	0,653617	0,000371	6,876513	0,000869
15	379,80	0,241421	15,563445	0,114213	0,643334	0,000375	6,834585	0,020276
20	376,15	0,312132	18,511205	0,171319	0,633613	0,000568	6,830491	0,018518
25	372,60	0,241421	21,378204	0,114213	0,624067	0,000382	6,810862	0,042575
30	369,20	0,382843	24,124063	0,228425	0,614838	0,000771	6,774371	0,002007
35	366,00	0,382843	26,708400	0,228425	0,606073	0,000778	6,781599	0,024527
40	362,85	0,453553	29,252358	0,285532	0,597370	0,000981	6,756487	0,002691
45	359,85	0,453553	31,675174	0,285532	0,589010	0,000989	6,745817	0,002786
50	356,95	0,453553	34,017230	0,285532	0,580862	0,000997	6,751524	0,027698
55	354,10	0,524264	36,318905	0,342638	0,572789	0,001207	6,739467	0,022129
60	351,35	0,453553	38,539820	0,285532				

Fuente: elaboración propia, ecuaciones 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27 y 28.

### Apéndice 23. Constante cinética y orden de reacción

Modelo de la forma:

$$\frac{1}{S} * \frac{dN^{PET}}{dt} = k_s (C^{KOH})^\alpha$$

Con:

- $S$  en  $m^2$
- $\frac{dN^{PET}}{dt}$  en mol/min
- $C^{KOH}$  en mol/l

$\varnothing$ (mm)	T (°C)	Repetición	$\alpha$	$\bar{\alpha}$	$\delta\alpha$	$k_s$	$\bar{k}_s$	$\delta k_s$
0,420	50	1	2,186613	2,081790	0,148241	183,008144	183,185053	0,250186
		2	1,976968			183,361961		
	70	1	2,245016	2,096140	0,210542	226,023364	261,009578	49,477978
		2	1,947264			295,995792		
	90	1	1,835025	1,765467	0,098370	291,914646	302,657377	15,192516
		2	1,695908			313,400108		
0,841	50	1	2,018104	1,785446	0,329027	41,729877	48,275864	9,257423
		2	1,552789			54,821850		
	70	1	1,944476	2,094746	0,212514	58,771771	57,571657	1,697218
		2	2,245016			56,371543		
	90	1	1,813764	1,826252	0,017662	75,354142	76,825307	2,080541
		2	1,838741			78,296471		
2,000	50	1	2,053757	1,909826	0,203549	6,426666	7,336852	1,287197
		2	1,765895			8,247038		
	70	1	1,887070	1,739317	0,208954	11,034000	11,219988	0,263026
		2	1,591564			11,405975		
	90	1	1,619135	1,762078	0,202151	12,162023	11,393888	1,086307
		2	1,905021			10,625753		

Fuente: elaboración propia.

Apéndice 24. **Comparación de la conversión fraccionaria obtenida por gravimetría y conductividad eléctrica**

$\varnothing$ (mm)	T (°C)	Repetición	$X_C^{PET}$ (%)	$X_G^{PET}$ (%)	Desviación (%)
0,420	50	1	29,587691	28,360000	4,149330
		2	26,562721	25,666667	3,373352
	70	1	35,496379	34,000000	4,215581
		2	37,781313	35,840000	5,138290
	90	1	38,741721	37,986667	1,948945
		2	38,337919	37,580000	1,976943
0,841	50	1	25,187734	24,186667	3,974425
		2	24,546074	23,080000	5,972743
	70	1	31,518899	29,913333	5,093979
		2	35,496379	34,073333	4,008987
	90	1	39,307045	37,906667	3,562666
		2	40,760735	40,026667	1,800920
2,000	50	1	22,896090	21,546667	5,893686
		2	24,087745	22,806667	5,318383
	70	1	32,111290	30,593333	4,727174
		2	28,218438	27,333333	3,136618
	90	1	33,976849	33,160000	2,404134
		2	35,026736	34,386667	1,827374
<b>Desviación promedio</b>					3,806863
<b>Desviación mínima</b>					1,800920
<b>Desviación máxima</b>					5,972743

Fuente: elaboración propia, ecuación 34.

Apéndice 25. **Determinación de propiedades termodinámicas de activación de la reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno**

$\emptyset$ (mm)	T (°C)	Repetición	$k_S$	$k_V$	$1/T$ (1/K)	$\ln\left(\frac{k_V}{T}\right)$
0,420	50	1	183,008144	0,001623	0,003095	-12,201779
		2	183,361961	0,001626	0,003095	-12,199848
	70	1	226,023364	0,002004	0,002914	-12,050722
		2	295,995792	0,002625	0,002914	-11,781016
	90	1	291,914646	0,002588	0,002754	-11,851548
		2	313,400108	0,002779	0,002754	-11,780528
0,841	50	1	41,729877	0,001484	0,003095	-12,291418
		2	54,821850	0,001949	0,003095	-12,018547
	70	1	58,771771	0,002089	0,002914	-12,009025
		2	56,371543	0,002004	0,002914	-12,050722
	90	1	75,354142	0,002679	0,002754	-11,817136
		2	78,296471	0,002784	0,002754	-11,778833
2,000	50	1	6,426666	0,001292	0,003095	-12,429558
		2	8,247038	0,001658	0,003095	-12,180160
	70	1	11,034000	0,002219	0,002914	-11,949084
		2	11,405975	0,002293	0,002914	-11,915928
	90	1	12,162023	0,002445	0,002754	-11,908395
		2	10,625753	0,002136	0,002754	-12,043433

Regresión lineal según el modelo:  $\ln\left(\frac{k_V}{T}\right) = -\frac{\Delta H^\ddagger}{R} * \left(\frac{1}{T}\right) + \ln\left(\frac{k_B}{h}\right) + \frac{\Delta S^\ddagger}{R}$

$\emptyset$ (mm)	pendiente	intercepto	$\Delta H^\ddagger$ J/mol	$\Delta S^\ddagger$ J/mol K	$\Delta G^\ddagger(25^\circ\text{C})$ J/mol
2,000	-1138,115	-8,653367	9 462,828	-269,500	89 814,206
0,841	-1040,097	-8,956366	8 647,856	-272,019	89 750,357
0,420	-987,637	-9,186402	8 211,683	-273,932	89 884,435
		<b>Promedio</b>	8 774,122	-271,817	89 816,333

Fuente: elaboración propia, ecuaciones 31, 32 y 33.

## Apéndice 26. Análisis de varianza

- a. Efecto del tamaño de partícula del tereftalato de polietileno sobre la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización mediante hidrólisis básica.

T (°C)	Probabilidad (%)	F	F <sub>critica</sub>	Hipótesis aceptada	
				H <sub>0</sub>	H <sub>1</sub>
50	6,9906	7,3392	9,5521	X	
70	16,9418	3,3991	9,5521	X	
90	2,8917	14,4216	9,5521		X

Conclusión: El tamaño de partícula no afecta significativamente a la conversión fraccionaria a 50 y 70 °C, pero a 90 °C el tamaño de partícula si afecta significativamente a la conversión fraccionaria.

- b. Efecto de la temperatura a la que se lleva a cabo la reacción sobre la conversión fraccionaria del tereftalato de polietileno en su reacción de despolimerización mediante hidrólisis básica.

Ø (mm)	Probabilidad (%)	F	F <sub>critica</sub>	Hipótesis aceptada	
				H <sub>0</sub>	H <sub>1</sub>
2,000	1,0546	29,6908	9,5521		X
0,841	1,0046	30,7173	9,5521		X
0,420	0,8484	34,5593	9,5521		X

Conclusión: la temperatura afecta significativamente a la conversión fraccionaria, cuando el tamaño de partícula es de 2,000, 0,841 y 0,420 mm.

- c. Efecto de la temperatura sobre la constante cinética de la reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno mediante hidrólisis básica.

$\emptyset$ (mm)	Probabilidad (%)	F	F <sub>critica</sub>	Hipótesis aceptada	
				H <sub>0</sub>	H <sub>1</sub>
2,000	4,2263	10,8628	9,5521		X
0,841	3,1023	13,6928	9,5521		X
0,420	6,0470	8,23638	9,5521	X	

Conclusión: la temperatura afecta significativamente a la constante cinética de reacción, cuando el tamaño de partícula es de 2,000 y 0,841 mm, pero a 0,420 mm la temperatura si afecta significativamente a la constante cinética de reacción.

- d. Efecto de la temperatura sobre el orden de reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno mediante hidrólisis básica.

$\emptyset$ (mm)	Probabilidad (%)	F	F <sub>critica</sub>	Hipótesis aceptada	
				H <sub>0</sub>	H <sub>1</sub>
2,000	69,6931	0,4082	9,5521	X	
0,841	43,7689	1,1020	9,5521	X	
0,420	20,9031	2,7587	9,5521	X	

Conclusión: la temperatura no afecta significativamente el orden de reacción, cuando el tamaño de partícula es de 2,000, 0,841 y 0,420 mm.

Apéndice 27. **Error típico y potencia estadística de los modelos lineales de la concentración de hidróxido de potasio en función de la conductividad eléctrica**

Variable independiente: $\kappa_{sol}$ (mS/cm)				
Variable dependiente: $C^{KOH}$ (mol/l)				
$T$ (°C)	$R^2$	$\hat{\sigma}$	$z_{1-\beta}$	$1 - \beta$
50	0,9983	0,0302	7,862	>99
70	0,9957	0,0479	6,724	>99
90	0,9962	0,0453	6,875	>99

Fuente: elaboración propia, ecuación 37.

Apéndice 28. **Error típico y potencia estadística del efecto de la temperatura sobre la cinética de despolimerización del tereftalato de polietileno**

Variable independiente: $T$ (°C)				
Variable dependiente: $X^{PET}$ (%)				
$\phi$ (mm)	$R^2$	$\hat{\sigma}$	$z_{1-\beta}$	$1 - \beta$
2,000	0,9904	0,8070	3,575	>99
0,841	0,9973	0,5661	4,677	>99
0,420	0,9319	2,0589	1,852	95-99

Fuente: elaboración propia, ecuación 37.

Apéndice 29. **Error típico y potencia estadística del efecto del tamaño de partícula sobre la cinética de despolimerización del tereftalato de polietileno**

Variable independiente: $\phi$ (mm)				
Variable dependiente: $X^{PET}$ (%)				
$T$ (°C)	$R^2$	$\hat{\sigma}$	$z_{1-\beta}$	$1 - \beta$
50	0,7792	0,0302	0,759	75-80
70	0,9371	0,0479	1,923	95-99
90	0,9319	0,0453	1,852	95-99

Fuente: Elaboración propia, ecuación 37.



Apéndice 30. **Análisis de laboratorio del espectro infrarrojo de los productos de la reacción de despolimerización del tereftalato de polietileno**



**Laboratorio de Análisis y Servicios, S.A**

5ª. Avenida 2-84 zona 1, Lomas de Portugal – Mixco, Guatemala, 01057




Tels: 2438-5863/73, 2438-7140 Fax: 24387385

E-mail: lablaser@grupolaser.com

Informe de análisis	300139-17
Nombre de la muestra	Ácido tereftálico
Empresa que provee la muestra	Walter Solís
Dirección de la empresa	Ciudad
Fecha de muestreo	No disponible
Fecha de recepción de la muestra	2017-11-16
Presentación / forma farmacéutica	Piedra
Recipiente de la muestra	Caja petri
Numero de lote	No disponible
Cantidad recibida	1 x 3 gramos
Fecha de fabricación	No disponible
Fecha de expiración	No disponible
No. Registro sanitario	No disponible
Motivo de análisis	Control de Calidad

Resultados	Fisicoquímicos
Análisis	Resultado
Corrimiento espectral	Corrimiento espectral de Ácido tereftálico

Metodología	Análisis	MIL	Fecha de ejecución del análisis	Fecha finalización	Analista
Determinación por espectrofotometría infrarroja.	Corrimiento espectral	12.010.172	2017-11-20	2017-11-20	AG

Observaciones
El resultado del análisis corresponde a la muestra tal y como se recibió
  

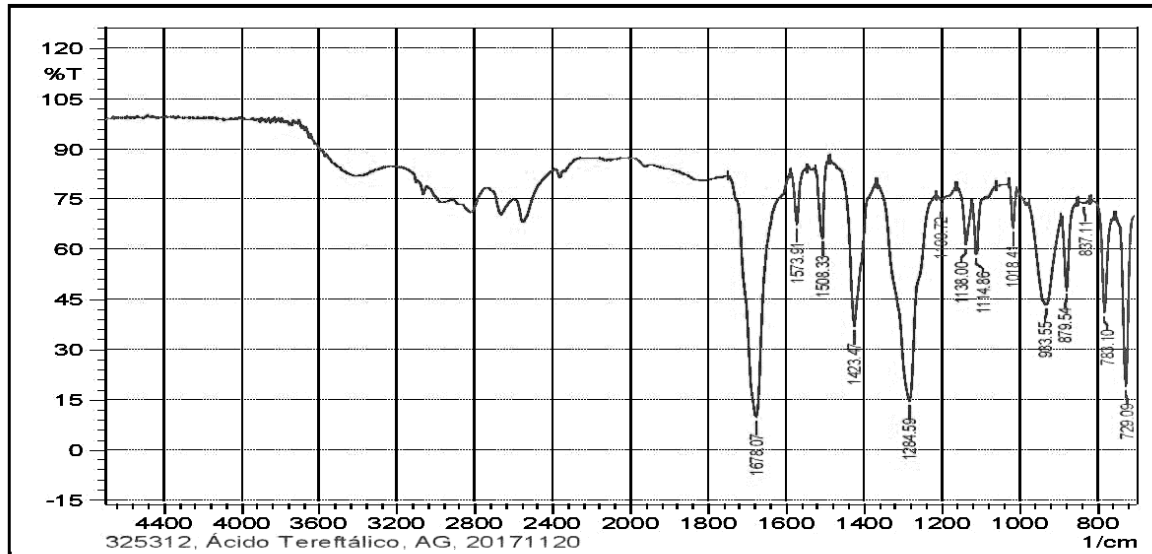
325312

Continuación del apéndice 30.

Picos 1/cm	729	783	837	880	934	1018	1115	1138	1200	1285	1423	1508	1574
Area	16	12	4	8	20	3	9	5	6	48	20	4	4

Walter Solís  
Ácido tereftálico

Fecha inicio	Hora	Resolución	No escaneos	Usuario	Analista	Ident.
2017-11-20	10:43:00 a.m.	8 (1/cm)	20	Lab. Laser	AG	Corrimiento



12:50 p.m. 22/11/2017

Fuente: elaboración propia, con datos obtenidos del Laboratorio de Análisis y Servicios  
S.A.

# ANEXOS

## Anexo 1. Dimensiones estándar de tamices

U.S.A. STANDARD SIEVES ASTM SPECIFICATION E-11						
Nominal Dimensions, Permissible Variations for Wirecloth of Standard Test Sieves (U.S.A.)						
Standard Series						
Sieve Designation	Nominal Sieve	Permissible	Opening	Maximum	Nominal Wire	
Standard (b)	Alternative	Opening, in. (see c below)	Variation of Average Opening from the Standard Sieve Designation	Dimension or Not More Than 5% of the Openings	Individual Opening	Diameter (mm) see a below
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)
125 mm	5"	5	±3.70 mm	130.0 mm	130.9 mm	8.00
106 mm	4.24"	4.24	±3.20 mm	110.2 mm	111.1 mm	6.30
100 mm (d)	4"	4	±3.00 mm	104.0 mm	104.8 mm	6.30
90 mm	3 1/2"	3.5	±2.70 mm	93.6 mm	94.4 mm	6.30
75 mm	3"	3	±2.20 mm	78.1 mm	78.7 mm	6.30
63 mm	2 1/2"	2.5	±1.90 mm	65.6 mm	66.2 mm	5.60
53 mm	2.12"	2.12	±1.60 mm	55.2 mm	55.7 mm	5.00
50 mm (d)	2"	2	±1.50 mm	52.1 mm	52.6 mm	5.00
45 mm	1 3/4"	1.75	±1.40 mm	46.9 mm	47.4 mm	4.50
37.5 mm	1 1/2"	1.5	±1.10 mm	39.1 mm	39.5 mm	4.50
31.5 mm	1 1/4"	1.25	±1.00 mm	32.9 mm	33.2 mm	4.00
26.5 mm	1.06"	1.06	±.800 mm	27.7 mm	28.0 mm	3.55
25.0 mm	1.00"	1	±.800 mm	26.1 mm	26.4 mm	3.55
22.4 mm	7/8"	0.875	±.700 mm	23.4 mm	23.7 mm	3.55
19.0 mm	3/4"	0.750	±.600 mm	19.9 mm	20.1 mm	3.15
16.0 mm	5/8"	0.625	±.500 mm	16.7 mm	17.0 mm	3.15
13.2 mm	.530"	0.530	±.410 mm	13.83 mm	14.05 mm	2.80
12.5 mm (d)	1/2"	0.500	±.390 mm	13.10 mm	13.31 mm	2.50
11.2 mm	7/16"	0.438	±.350 mm	11.75 mm	11.94 mm	2.50
9.5 mm	3/8"	0.375	±.300 mm	9.97 mm	10.16 mm	2.24
8.0 mm	5/16"	0.312	±.250 mm	8.41 mm	8.58 mm	2.00
6.7 mm	.265"	0.265	±.210 mm	7.05 mm	7.20 mm	1.80
6.3 mm (d)	1/4"	0.250	±.200 mm	6.64 mm	6.78 mm	1.80
5.6 mm	NO. 3 1/2(e)	0.223	±.180 mm	5.90 mm	6.04 mm	1.60
4.75 mm	NO. 4	0.187	±.150 mm	5.02 mm	5.14 mm	1.60
4.0 mm	NO. 5	0.157	±.130 mm	4.23 mm	4.35 mm	1.40
3.35 mm	NO. 6	0.132	±.110 mm	3.55 mm	3.66 mm	1.25
2.8 mm	NO. 7	0.110	±.095 mm	2.975 mm	3.070 mm	1.12
2.36 mm	NO. 8	0.0937	±.080 mm	2.515 mm	2.600 mm	1.00
2.0 mm	NO. 10	0.0787	±.070 mm	2.135 mm	2.215 mm	.900
1.7 mm	NO. 12	0.0661	±.060 mm	1.820 mm	1.890 mm	.800

Continuación de anexo 1.

1.4 mm	NO. 14	0.0555	±.050 mm	1.505 mm	1.565 mm	.710
1.18 mm	NO. 16	0.0469	±.045 mm	1.270 mm	1.330 mm	.630
1.0 mm	NO. 18	0.0394	±.040 mm	1.080 mm	1.135 mm	.560
850 µm (f)	NO. 20	0.0331	±35 µm	925 µm	970 µm	.500
710 µm	NO. 25	0.0278	±30 µm	775 µm	815 µm	.450
600 µm	NO. 30	0.0234	±25 µm	660 µm	695 µm	.400
500 µm	NO. 35	0.0197	±20 µm	550 µm	585 µm	.315
425 µm	NO. 40	0.0165	±19 µm	471 µm	502 µm	.280
355 µm	NO. 45	0.0139	±16 µm	396 µm	425 µm	.224
300 µm	NO. 50	0.0117	±14 µm	337 µm	363 µm	.200
250 µm	NO. 60	0.0098	±12 µm	283 µm	306 µm	.160
212 µm	NO. 70	0.0083	±10 µm	242 µm	263 µm	.140
180 µm	NO. 80	0.0070	±9 µm	207 µm	227 µm	.125
150 µm	NO. 100	0.0059	±8 µm	174 µm	192 µm	.100
125 µm	NO. 120	0.0049	±7 µm	147 µm	163 µm	.090
106 µm	NO. 140	0.0041	±6 µm	126 µm	141 µm	.071
90 µm	NO. 170	0.0035	±5 µm	108 µm	122 µm	.063
75 µm	NO. 200	0.0029	±5 µm	91 µm	103 µm	.050
63 µm	NO. 230	0.0025	±4 µm	77 µm	89 µm	.045
53 µm	NO. 270	0.0021	±4 µm	66 µm	76 µm	.036
45 µm	NO. 325	0.0017	±3 µm	57 µm	66 µm	.032
38 µm	NO. 400	0.0015	±3 µm	48 µm	57 µm	.030
32 µm	NO. 450	0.0012	±3 µm	42 µm	50 µm	.028
25 µm (d)	NO. 500	0.0010	±3 µm	34 µm	41 µm	.025
20 µm (d)	NO. 635	0.0008	±3 µm	29 µm	35 µm	.020

- a) The average diameter of the wires in the x and y direction, taken separately, of any wire cloth shall not deviate from the nominal values by more than ±15%.
- b) These standard designations correspond to the values for test sieve openings recommended by the International Organization for Standardization (ISO) Geneva, Switzerland, except where noted.
- c) Only approximately equivalent to the metric values in column 1.
- d) These sieves are not in the standard series but they have been included because they are in common usage.
- e) These numbers (3 1/2 to 635) are the approximate number of openings per linear inch, but it is preferred that the sieve be identified by the standard designation in millimeters or micrometers.
- f) 1,000 µm=1 mm

Fuente: *Standard Sieves*. [www.solutionsdirectonline.com/advantech/pdf/standard-sieves-astm-e-11-specifications-table.pdf](http://www.solutionsdirectonline.com/advantech/pdf/standard-sieves-astm-e-11-specifications-table.pdf) Consulta: 11 de diciembre de 2017.

## Anexo 2. Conductividad eléctrica de soluciones acuosas a 20 °C

Electrical Conductivity  $\kappa$  in mS/cm for the Indicated Concentration in Mass Percent

Name	Formula	0.5%	1%	2%	5%	10%	15%	20%	25%	30%	40%	50%
Acetic acid	CH <sub>3</sub> COOH	0.3	0.6	0.8	1.2	1.5	1.7	1.7	1.6	1.4	1.1	0.8
Ammonia	NH <sub>3</sub>	0.5	0.7	1.0	1.1	1.0	0.7	0.5	0.4			
Ammonium chloride	NH <sub>4</sub> Cl	10.5	20.4	40.3	95.3	180						
Ammonium sulfate	(NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	7.4	14.2	25.7	57.4	105	147	185	215			
Barium chloride	BaCl <sub>2</sub>	4.7	9.1	17.4	40.4	76.7	109.0	137.0				
Calcium chloride	CaCl <sub>2</sub>	8.1	15.7	29.4	67.0	117	157	177	183	172	106	
Cesium chloride	CsCl	3.8	7.4	13.8	32.9	65.8	102	142				
Citric acid	H <sub>3</sub> C(OH)(COO) <sub>3</sub>	1.2	2.1	3.0	4.7	6.2	7.0	7.2	7.1			
Copper(II) sulfate	CuSO <sub>4</sub>	2.9	5.4	9.3	19.0	32.2	42.3					
Formic acid	HCOOH	1.4	2.4	3.5	5.6	7.8	9.0	9.9	10.4	10.5	9.9	8.6
Hydrogen chloride	HCl	45.1	92.9	183								
Lithium chloride	LiCl	10.1	19.0	34.9	76.4	127	155	170	165	146		
Magnesium chloride	MgCl <sub>2</sub>	8.6	16.6	31.2	66.9	108	129	134	122	98		
Magnesium sulfate	MgSO <sub>4</sub>	4.1	7.6	13.3	27.4	42.7	54.2	51.1	44.1			
Manganese(II) sulfate	MnSO <sub>4</sub>		6.2	10.6	21.6	34.5	43.7	47.6				
Nitric acid	HNO <sub>3</sub>	28.4	56.1	108								
Oxalic acid	H <sub>2</sub> C <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	14.0	21.8	35.3	65.6							
Phosphoric acid	H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	5.5	10.1	16.2	31.5	59.4	88.4	118	146	173	209	
Potassium bromide	KBr	5.2	10.2	19.5	47.7	95.6	144	194				
Potassium carbonate	K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	7.0	13.6	25.4	58.0	109	152	188	223			
Potassium chloride	KCl	8.2	15.7	29.5	71.9	143	208					
Potassium dihydrogen phosphate	KH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub>	3.0	5.9	11.0	25.0	44.6						
Potassium hydrogen carbonate	KHCO <sub>3</sub>	4.6	8.9	17.0	38.8	72.4	101	128				
Potassium hydrogen phosphate	K <sub>2</sub> HPO <sub>4</sub>	5.2	9.9	18.3	40.3							
Potassium hydroxide	KOH	20.0	38.5	75.0	178							
Potassium iodide	KI	3.8	7.5	14.2	35.2	71.8	110	188	224			
Potassium nitrate	KNO <sub>3</sub>	5.5	10.7	20.1	47.0	87.3	124	157	182			
Potassium permanganate	KMnO <sub>4</sub>	3.5	6.9	13.0	30.5							
Potassium sulfate	K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	5.8	11.2	21.0	48.0	88.6						
Silver(I) nitrate	AgNO <sub>3</sub>	3.1	6.1	12.0	26.7	49.8	72.0	92.8	112	129	162	
Sodium acetate	NaCH <sub>3</sub> COO	3.9	7.6	14.4	30.9	53.4	64.1	69.3	69.2	64.3		
Sodium bromide	NaBr	5.0	9.7	18.4	44.0	84.6	122	157	191	216		
Sodium carbonate	Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	7.0	13.1	23.3	47.0	74.4	88.6					
Sodium chloride	NaCl	8.2	16.0	30.2	70.1	126	171	204	222			
Sodium citrate	Na <sub>3</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O <sub>7</sub>		7.4	12.8	26.2	42.1	52.0	57.1	57.3	53.5		
Sodium dihydrogen phosphate	NaH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub>	2.2	4.4	9.1	21.0	33.2	43.3	49.6	53.1	54.0	46.1	
Sodium hydrogen carbonate	NaHCO <sub>3</sub>	4.2	8.2	15.0	31.4							
Sodium hydrogen phosphate	Na <sub>2</sub> HPO <sub>4</sub>	4.6	8.7	15.6	31.4							
Sodium hydroxide	NaOH	24.8	48.6	93.1	206							
Sodium nitrate	NaNO <sub>3</sub>	5.4	10.6	20.4	46.2	82.6	111	134	152	165	178	
Sodium phosphate	Na <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	7.3	14.1	22.7	43.5							
Sodium sulfate	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	5.9	11.2	19.8	42.7	71.3	91.1	109				
Sodium thiosulfate	Na <sub>2</sub> S <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	5.7	10.7	19.5	43.3	76.7	104	123	134	136	118	
Strontium chloride	SrCl <sub>2</sub>	5.9	11.4	22.0	49.1	91.5	127	153	168	178		
Sulfuric acid	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	24.3	47.8	92	211							
Trichloroacetic acid	CCl <sub>3</sub> COOH	10.3	19.6	37.2	84.7	148	193	221				
Zinc sulfate	ZnSO <sub>4</sub>	2.8	5.4	10.0	20.5	33.7	43.3					

Fuente: *Electrical Conductivity*. [https://sites.chem.colostate.edu/diverdi/all\\_courses/CRC%20reference%20data/electrical%20conductivity%20of%20aqueous%20solutions.pdf](https://sites.chem.colostate.edu/diverdi/all_courses/CRC%20reference%20data/electrical%20conductivity%20of%20aqueous%20solutions.pdf)

Consulta: 11 de diciembre de 2017

