

FIGURA 1. (x 400) Sin atacar la muestra.

En los ensayos 2 y 3, al variarse los porcentajes del nodulizante y ferrosilicio 75 % empleados, se observó una buena asimilación del magnesio con un contenido residual del 0,07-0,09 %. En la microestructura de la probeta sin atacar (foto 2) se aprecia una nodulación efectiva, uniforme y con presencia de nódulos correctamente distribuidos.

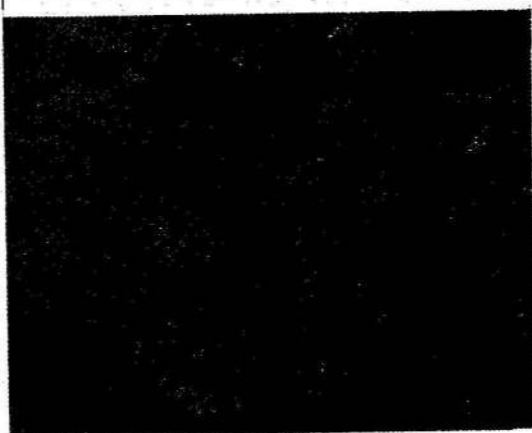


FIGURA 2. (x 400) Sin atacar la muestra.

En los ensayos mecánicos realizados a las probetas según las normas cubanas, se obtuvieron valores promedio de 500-520 MPa de resistencia a la tracción y 2,2 % de alargamiento relativo.

CONCLUSIONES

Con este trabajo se demuestran las posibilidades que existen en el taller de fundición de la EMN para producir, con calidad, los nodulizantes base níquel que necesita el país, ya que se cuenta con el equipamiento indispensable, el personal calificado y la materia prima fundamental (sinter de níquel). Además, la cantidad de nodulizantes que se necesita para producir el hierro nodular con altas propiedades

de mecánicas no excede del 3 - 4 % de la carga según las condiciones del taller.

La producción del nodulizante por la tecnología actual tiene un costo de \$ 4 016,92, mientras que con la tecnología propuesta el costo es de \$ 3 982,37, lo que significa un ahorro de \$ 34,55 por cada tonelada fundida.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- ALVAREZ, M.M.: "Control de la calidad del hierro nodular en el método Sandwich. Moldeo y fundición", Ashland de México, No. 57, p. 13-21, 1989.
- BIEDERMANN, A. y M. HASSENKJEFF: Tratado Moderno de Fundición del Hierro y el Acero, Ed. Ciencia y Técnica, La Habana, 1957.
- CAPELLO, E.: Tecnología de Fundición, Ed. Gustavo Gilí, Barcelona, 1971.
- Colectivo de Autores: "El hierro nodular, una experiencia en Holguín", Técnica Popular, No. 5, p. 2-13, 1989.
- GULIAEV, A.P.: Metalografía, Tomos I y II, Ed. Mir, Moscú, 1978.
- Handbook, A.S.M.: Metals reference, 2da. edición, Ed. American Society for Metals, 1982.
- JIMUCHIN, F.F.: Nerschabeioshie stalli, Mockba, 1967 (en ruso).
- KARSAY, S.I.: "Fundición con esferoidal I". Producción, p. 15-21, 1976.
- : "Fundición con grafito esferoidal III". Alimentación y Mazarota, p. 18-24, 1976.
- KOSMIN, B.A. y A.I. SAMAJOTKI: Metalurgia, Metalografía y Materiales de Construcción, Ed. Mir, Moscú, 1986.
- KUDRIN, V.S.: Metalurgia del Acero, Ed. Mir, Moscú, 1987.
- LASHERAS, J.M.: Tecnología del Acero, 2da. edición, Ed. Zaragoza, España, 1967.
- Literatura sobre hierro nodular de la firma FOSECO.
- Normas Gost 2176-77, Propiedades especiales de los aceros aleados.
- Normas cubanas: 04-03-73
04-01-72
- Norma ASTM E 407-89.
- Norma UNI 3244 y 3245.
- RODRIGUEZ, M.M.: Control de la calidad del hierro nodular en el método Sandwich, Moldeo y Fundición", Ashland de México, No. 57, p. 13-21, 1989.
- SALCINES, C.M.: Tecnología de fundición, Tomo I, Ed. Ciencia y Técnica, La Habana, 1981.
- TITOV, N. y Y.A. STEPANOV: Tecnología del proceso de fundición, Ed. Mir, Moscú, 1987.

APLICACION DE LAS TECNICAS DE COMPUTACION AL ESTUDIO CINETICO DE REACCIONES HOMOGENEAS IRREVERSIBLES

Lic. Jorge Arce Molina
Ing. Miguel Garrido Rodríguez
Lic. Carlos Izaguirre Bonilla

Instituto Superior Minero Metalúrgico

RESUMEN: El presente trabajo muestra la metodología a seguir para obtener la ecuación de velocidad de reacciones homogéneas irreversibles por los métodos diferencial e integral de análisis de datos.

Se realiza un programa con la metodología de ambos métodos que puede ser utilizado tanto en la actividad docente como en la resolución de problemas durante la investigación.

ABSTRACT: In the present paper the methodology to be followed in order to obtain the kinetic equation of irreversible homogeneous chemical reactions for the integral and differential methods in the analysis of data is shown.

A program with the methodology of both methods was done that can be used as means of teaching activities and in solving problems in research works.

INTRODUCCION

Gran importancia ha adquirido el empleo de medios técnicos modernos para la enseñanza, al extremo de convertirse conjuntamente con los métodos en uno de los componentes fundamentales de la didáctica.

Desde la aparición de las computadoras en los centros de enseñanza superior, se utilizan como equipo de soporte ideal para la materialización de los sistemas de enseñanza programada. El rápido desarrollo de la informática permitió la aparición de lenguajes más evolucionados, unido a esto, las posibilidades de graficar en la pantalla representaron un salto cualitativo que permitió poder utilizar las técnicas de computación

como instrumento de enseñanza y aprendizaje muy variado.

Como es conocido, los medios de enseñanza son el soporte de los métodos de enseñanza por lo que se convierten en instrumento eficaz para la adquisición de habilidades prácticas por parte de los estudiantes y conlleva a la necesidad de que el estudiante sepa qué quiere y a qué debe llegar, expresando esto en término deductivo por lo que se hace necesario una estructuración lógica del pensamiento, a ello puede contribuir la utilización de esquemas lógicos, métodos de cálculo y metodología de solución de determinados problemas que se muestran en este trabajo.

DESARROLLO

En los sistemas homogéneos a volumen constante la velocidad de reacción referida a un reactivo i está dada por:

$$r_i = - \frac{dc_i}{dt} \quad (1)$$

Por otra parte es conocido que la ecuación cinética de velocidad para una reacción dada es la expresión matemática que relaciona la velocidad de reacción (r_i) con las propiedades de estado del sistema reaccionante, es decir, temperatura, presión y composición.

$$r_i = f(\text{temperatura}) f(\text{presión}) f(\text{composición}) \quad (2)$$

Para una reacción general a T y V constante:



donde:

$$r_A = - \frac{dC_A}{dt} = k C_A^a \cdot C_B^b \cdot C_C^c \quad (4)$$

k : velocidad específica de la reacción o constante de velocidad

C_A, C_B, C_C : concentraciones de A, B y C respectivamente

a, b, c : orden de reacción con respecto a A, B y C

r_A : velocidad de reacción

Pero:

$$k = k^0 \cdot e^{-E/RT} \quad (5)$$

donde:

k^0 : factor frecuencia

E : energía de activación de la reacción

T : temperatura

R : constante universal de los gases

Esta ecuación se conoce como ecuación de Arrhenius y permite analizar la influencia de la temperatura sobre la velocidad de reacción.

Para la ecuación general (4) obtendremos:

$$r_A = k^0 \cdot e^{-E/RT} \cdot C_A^0 \cdot C_B^0 \cdot C_C^0 \dots \quad (6)$$

METODO INTEGRAL DE ANALISIS DE DATOS

En el método gráfico integral de análisis de datos se toma una ecuación cinética particular, se integra, se obtiene la ecuación de una recta, se realiza el ajuste en un gráfico y si el ajuste no es satisfactorio, se sugiere ensayar otra ecuación realizando las mismas operaciones.

Fueron estudiadas las siguientes reacciones:

1. Reacciones de orden Cero cuya ecuación cinética está dada por:

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k \quad (7)$$

y la ecuación integrada es

$$C_A = C_{A0} - k \cdot t \quad (8)$$

esta es una reacción del tipo $A \rightarrow \text{productos}$

2. Reacciones monomoleculares de primer orden de tipo



cuya ecuación cinética es

Con el objetivo de determinar la ecuación cinética se emplean dos métodos: el integral y el diferencial.

En el presente programa se puede obtener la ecuación cinética de una reacción química aplicando ambos métodos.

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k \cdot C_A \quad (9)$$

y la ecuación integrada es

$$\ln C_A = \ln C_{A0} - k \cdot t \quad (10)$$

3. Reacciones bimoleculares irreversibles de segundo orden de tipo



Si $C_A = C_B$, entonces la ecuación anterior puede escribirse de la siguiente forma: $2A \rightarrow \text{Productos}$, cuya ecuación cinética está dada por

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k \cdot C_A^2 \quad (11)$$

y la ecuación integrada es

$$\frac{1}{C_A} = \frac{1}{C_{A0}} + k \cdot t$$

METODO INTEGRAL ANALITICO

En este método se plantean las ecuaciones de distintos órdenes, se integran, se despejan las constantes específicas y se calculan. En la ecuación, que para diversos valores de tiempo, se mantengan constante o más cons-

tante los valores de k, ese da el orden de reacción y la constante específica, o sea, esa será la ecuación que representa la cinética de la reacción.

APLICACION DEL METODO DIFERENCIAL

Procedimiento gráfico

En el método diferencial se aplica directamente la ecuación diferencial a ensayar, se evalúan todos los términos de la ecuación incluida la derivada dc_i/dt y se ensaya la exactitud del ajuste de la ecuación con los datos experimentales.

En el caso de las reacciones de orden simple que se ajustan a la ecuación general:

$$r_i = \frac{dc_i}{dt} = k \cdot C^n \quad (13)$$

Se siguen los siguientes pasos:

1. Con los datos de concentración y tiempo se construye un gráfico trazándose la línea continua que se ajuste a los puntos representados.
2. Se determinan las pendientes para distintos valores de concentración a intervalos regulares de tiempo, estas pendientes dc_i/dt son las velocidades de reacción para las concentraciones y tiempos considerados.
3. Aplicando propiedades de logaritmo a la ecuación cinética (13) se obtiene la siguiente ecuación correspondiente a una recta.

RESULTADOS

El programa consta de las siguientes partes: menú principal, parte instructiva y parte operativa.

Parte instructiva: contiene indicaciones generales donde se encuentran las metodologías para aplicar los

métodos integral y diferencial y posee un editor que da gran flexibilidad en el caso de ser necesaria alguna corrección.

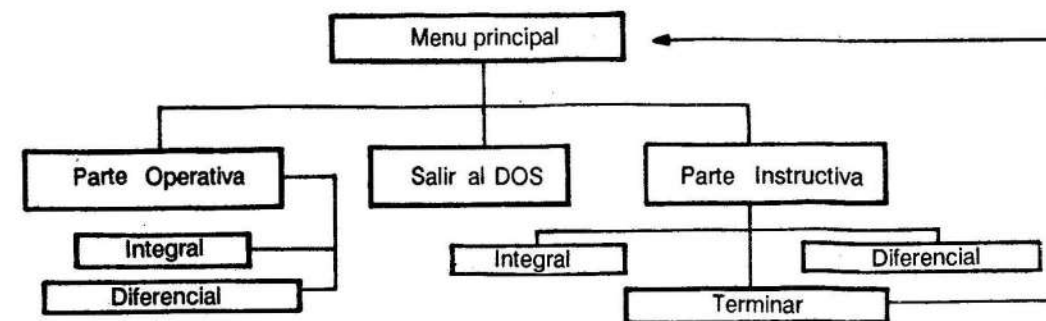
Parte operativa: permite, con la introducción de los datos la obtención del gráfico y a partir de éste el orden y la constante de velocidad de reacción. El gráfico se ajusta utilizando el método de los mínimos cuadrados presente

en la UNIT desarrollada por el Departamento de Matemática del ISMM de Moa.

Es posible analizar la influencia de la temperatura en la velocidad de la reacción a partir de la ecuación de Arrhenius.

El programa se realizó en Turbo Pascal versión 5.5, soportado sobre sistema operativo MS-DOS y tiene la siguiente estructura:

DIAGRAMA DE ESTRUCTURA



CONCLUSIONES

1. Se confeccionó un programa que permite ser utilizado como medio de enseñanza en proceso docente educativo referente al estudio cinético de las reacciones sencillas homogéneas.
2. El programa puede ser utilizado en el análisis de datos experimentales, realización de clases prácticas, prácticas de laboratorio y en investigaciones relacionadas con este tema.
3. El programa contiene la metodología para el análisis de datos a partir de los métodos integral y diferencial, lo que permite la interacción constante del objeto de estudio y el usuario.
4. El programa como medio de enseñanza ha permitido una mayor motivación en la realización de actividades docentes, así como una estrecha vinculación de las técnicas de computación con la Química Física del perfil metalúrgico, lo que puede ser extensivo a otras esferas.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- ARCE MOLINA, J.: "Enseñanza de la estereoquímica por computadora". Trabajo de Diploma, Universidad de Oriente, 1991.
- BERBERRENA GONZALEZ, V., N. VALDES y D. ISADA: "Programa para el cálculo de la ecuación cinética completa por el método integral de análisis de datos", Revista Tecnología Química. No. 1, p. 1-7, 1992.
- CUBERO ALLENDE, J. y otros: Los Medios de Enseñanza en la Educación Superior, Universidad de La Habana, 1985.
- GLASTONE, S.: Tratado de Química Física, Ed. Revolucionaria, La Habana, 1180 p. 1969.
- GRAY, N.: Computer-Assisted Structure Elucidation, John Wiley & Sons, 1986.
- IAN O, A.: Advanced Graphics with the IBM Personal Computer, Publ. MACMILLAN EDUCATION LTD, Printed Hong Kong, 1989.
- LEVENSPIEL, D.: Ingeniería de las Reacciones Químicas, Ed. Pueblo y Educación, La Habana, 638 p., 1985.
- MATOS TAMAYO, R. y R. HENG CORTON: Aspectos Fundamentales de la Química Física, Ed. Pueblo y Educación, La Habana, Tomo II, 343 p., 1986.

ecimetal

**EMPRESA COMERCIAL PARA LA
INDUSTRIA METALURGICA Y
METAL-MECANICA**