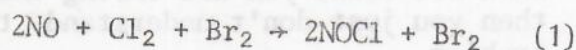


CATALIZADORES MATEMATICOS

F. Alejandro Nava

¿Qué es un catalizador? En palabras de la Enciclopedia de Tecnología Química:¹ "Se da el nombre de 'Catálisis' a la variación de la velocidad de una reacción química por la sola presencia de alguna sustancia que aparece inalterada en los productos de reacción. A las sustancias con esta propiedad se les llama 'Catalizadores'".

Comúnmente, al hablar de catalizadores se hace referencia a los que aceleran una reacción y debe hacerse hincapié en que un catalizador es una sustancia que al final de una reacción aparece inalterada y, como antes de ser añadida a las sustancias reaccionantes, no se encuentra en combinación con éstas. Como ejemplo, en la reacción del óxido nítrico (NO) con el cloro (Cl) para formar cloruro de nitrosilo (NOCl) se puede usar bromo (Br) como catalizador y la reacción es la siguiente:



¿Es realmente necesario el bromo?

Hace algún tiempo en la sección de divulgación científica de alguna revista de ciencia-ficción apareció un ejemplo muy simpático acerca de la acción de catalizadores; planteaba una ecuación del tipo:

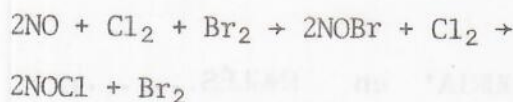
ladrillos + cemento + hombre → Casa (compuesto de ladrillos + cemento) + hombre

Si uno observara únicamente el principio y el final de la reacción, pero no viera al hombre trabajando, podría preguntarse: ¿Es realmente necesario el hombre?

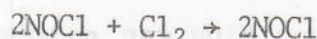
¹Kirk & Othmer (1961) Ed. UTEHA.

Indudablemente debemos admitir que exista una cierta probabilidad de que si dejamos juntos una pila de ladrillos y una tina de cemento, éstos se mezclen espontáneamente dando por resultado una casa. Esta probabilidad es, sin embargo, pequeña y la gente que construye casas prefiere acelerar el proceso usando un hombre como catalizador.

Volviendo ahora a nuestra reacción química fijémonos en las reacciones intermedias y veremos al bromo trabajando:



podemos eliminar al Br del principio y del final de la reacción (1)



y la ecuación sigue siendo perfectamente válida.

Hablemos ahora de matemáticas y veamos un ejemplo del uso del Cálculo de Variaciones. Se trata de minimizar o maximizar un funcional del tipo:

$$I = \int_a^b f(x, y, y') dx \quad (2)$$

donde $y' = \frac{dy}{dx}$ y f es una función dada, tomándose la integral a lo largo de la curva $y(x)$ con

$$y(a) = A \quad (3)$$

$$y(b) = B$$

Nuestro problema es encontrar la curva que hace de (2) un máximo o mínimo, para ello consideraremos en vez de $y(x)$ a $y(x) + \delta y(x)$ donde $\delta y(x) = \epsilon \eta(x)$ es una pequeña variación de la curva entera siendo ϵ un parámetro real y $\eta(x)$

alguna función diferenciable tal que

$$\begin{aligned} \eta(a) &= 0 \\ \eta(b) &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

de tal manera que sean satisfechas las condiciones (3). (Escribiremos por comodidad $y \equiv y(x)$, $\delta y = \delta y(x)$, $\eta \equiv \eta(x)$)

Ahora, debido a la variación δy en y , el funcional tendrá una variación δI , y de (2):

$$I + \delta I = \int_a^b f(x, y + \epsilon \eta, y' + \epsilon \eta') dx \quad (5)$$

La ecuación (5) es continuamente derivable con respecto a ϵ para cualquier $\eta(x)$, por lo tanto, para cualquier $y(x)$ y $\eta(x)$ dadas, $I + \delta I$ será máximo o mínimo para:

$$\frac{d}{d\epsilon} (I + \delta I) = 0 \quad (6)$$

Si $y(x)$ es la curva buscada que resulta en I máxima o mínima, entonces la variación δI debe ser cero para cualquier δy , en particular para $\epsilon = 0$. Por lo tanto, la curva $y(x)$ para la cual I es máximo o mínimo debe ser tal que:

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} (I + \delta I) \right|_{\epsilon=0} = 0 \quad (7)$$

Dejemos aquí este razonamiento que nos llevaría hasta la ecuación de Euler-Lagrange y analicemos lo que hemos hecho; ¿Qué le hemos aumentado a la integral? $\epsilon \eta$. Después hemos hecho $\epsilon = 0$. ¿Cuánto vale ahora $\epsilon \eta$? Cero. O sea que realmente pusimos algo y después lo quitamos haciéndolo cero. Ah, pero vemos que nuestra $\epsilon \eta$ pasa a formar parte de la ecuación en (5), reacciona con ella en (6) y es quitada en (7) y nos ha permitido hacer un trabajo que de otra forma

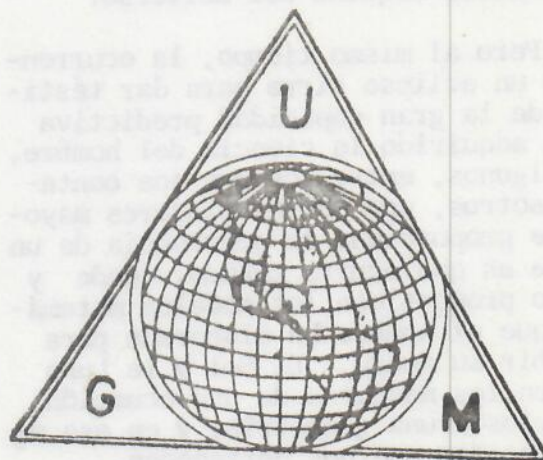
podría haber sido muy tardado.

¿No consiste acaso el cálculo de variaciones en el uso de un Catalizador matemático?

REUNION ANUAL

1984

U.G.M.



CIUDAD DE LA PAZ

BAJA CALIFORNIA SUR

NOVIEMBRE 1984