

Simulando estequiometría con la hoja de cálculo: uso de la barra de desplazamiento

Simulating stoichiometry with spreadsheet: use of the scroll bar

ANDRÉS RAVIOLO

Universidad Nacional de Río Negro. Bariloche. Argentina.

araviolo@unrn.edu.ar

Resumen

Se presenta una secuencia de actividades para enseñar estequiometría con sencillas hojas de cálculo que incorporan como recurso interactivo a la barra de desplazamiento. En esta propuesta alternativa a la resolución rutinaria de ejercicios, los estudiantes se encuentren motivados y activos confeccionando simulaciones numéricas y respondiendo preguntas del tipo ¿“qué pasa si...?” La visualización simultánea de las cantidades experimentales iniciales y finales, y de la relación estequiométrica, permite hacer frente a concepciones alternativas de los estudiantes.

Palabras clave: *Estequiometría, enseñanza, simulación, hoja de cálculo, barra de desplazamiento*

Abstract

A sequence of activities is presented for use in the teaching of stoichiometry by means of simple spreadsheets that have the scroll bar incorporated as an interactive resource. Using this method as an alternative to routine ways of doing exercises, students will become more motivated and active, setting up numerical simulations and answering questions like “What happens if...?” Simultaneous visualization of initial and final experimental quantities, and of the stoichiometric relation, makes it possible to deal with students’ alternative conceptions.

Keywords: *Stoichiometry, teaching, simulation, spreadsheets, scroll bar*

INTRODUCCION

La estequiometría es uno de los núcleos conceptuales centrales de la química dado que se ocupa de los aspectos cuantitativos de la reacción química. Por su complejidad los estudiantes presentan dificultades que van más allá de cuestiones matemáticas (como el dominio de la proporcionalidad) y mantienen concepciones alternativas luego de la enseñanza. Esto se debe a que la estequiometría aborda las relaciones cuantitativas de la química sobre una base cualitativa, conceptual. Resolver situaciones sobre estequiometría implica la comprensión de varios conceptos como: reacción química, reactivos y productos, fórmula química, ecuación química, subíndices y coeficientes estequiométricos.

Entre las dificultades que la investigación didáctica ha detectado en el aprendizaje de la estequiometría se encuentran:

- confunden distintas cantidades químicas (moles, concentraciones, masas, volúmenes) que se ponen en juego en la resolución de problemas (Frazer y Servant, 1987)

- no conservan la masa y los átomos en una reacción química, o presentan problemas con la conservación de los átomos y la no conservación de las moléculas en el cambio químico (Mitchell y Gunstone, 1984)

- sostienen que el reactivo limitante es la sustancia que tiene el menor coeficiente estequiométrico en la ecuación química balanceada (Huddle y Pillay, 1996)

- comprenden en forma incompleta la ecuación química y su relación con la situación empírica. Algunos estudiantes partiendo de la composición inicial del sistema no logran determinar el estado final empleando la ecuación química (Arasasingham y otros, 2004)

- afirman que para que se produzca el cambio químico es necesario que los reactivos estén en la situación inicial en una proporción particular (por ejemplo la proporción dada por los coeficientes estequiométricos), dado que se confunde el lado izquierdo de la ecuación química con el estado inicial del sistema (Gauchon y Méheut, 2007; Raviolo, 2006).

En lo que respecta a su enseñanza, y al igual que en la enseñanza de muchos otros conceptos de la química, se aprecia cierta monotonía metodológica centrada en la resolución de ejercicios con, generalmente, poco trabajo experimental y escaso uso de variados recursos didácticos. Para lograr una mayor motivación de los estudiantes se ha propuesto, por ejemplo, el planteo de problemas de estequiometría con sustancias de la vida cotidiana de mayor familiaridad para los alumnos (Pinto y León, 2009) o el uso de analogías (Raviolo y Lerzo, 2014).

En este artículo se presenta un método sencillo para resolver problemas de estequiometría utilizando la hoja de cálculo (por ejemplo, Excel y Calc) que incluye un recurso interactivo como es el uso de la barra de desplazamiento.

Las hojas de cálculo presentan una gran potencialidad para la enseñanza de las ciencias (Raviolo, 2002a y 2011), sus primeras aplicaciones en la enseñanza de la química se aprecian a mediados de la década del 80 (Rosenberg, 1985). Su disponibilidad, versatilidad y utilidad para tratar datos químicos fue resaltada por muchos autores, entre ellos: Van Houten, 1988; Collins y Williams, 1995; Zielinski y Swift, 1997. Al respecto, son significativos los siguientes atributos de las hojas de cálculo: (a) son de rápido aprendizaje y de uso inmediato, (b) en muchos casos pueden reemplazar a un lenguaje de programación de difícil aprendizaje y (c) dada su capacidad para simular permiten responder preguntas del tipo “¿qué pasa si...?”. En un artículo anterior (Raviolo, 2012a) se describió la utilidad y versatilidad de las hojas de cálculo en la verificación y re-creación de simulaciones ya diseñadas que se pueden encontrar en Internet.

Las simulaciones numéricas que se construirán se basan en los planteos ICF, que discriminan las situaciones: Inicial, Cambio y Final. Esto ayuda a visualizar la composición en distintos momentos de la reacción y diferenciarla de la relación estequiométrica (la proporción en la cual reaccionan las especies). Una propuesta de utilización de la barra de desplazamiento para el equilibrio químico con planteos ICE (Inicial, Cambio y Equilibrio) se encuentra en Raviolo (2012b).

El procedimiento desarrollado permite hacer frente a algunos inconvenientes que se presentan en los estudiantes, como por ejemplo la confusión entre los coeficientes estequiométricos y las cantidades presentes en una reacción, dado que frecuentemente: (a) consideran que las sustancias están presentes en cantidades iguales a los coeficientes, o (b) asignan como coeficientes a las cantidades experimentales.

La secuencia seguida en este artículo, de complejidad creciente (tanto química como informática), podría ser utilizada como secuencia metodológica para trabajar con los

alumnos, tanto del nivel medio como universitario. En ella, la formulación de preguntas por parte del docente es un aspecto clave, estas preguntas deben desafiar a los estudiantes y provocar acciones con la simulación.

1. Estequiometría con número de moles

El método se basa en las relaciones estequiométricas que se establecen entre las sustancias en una reacción química. Se parte de la ecuación química ajustada, por ejemplo, para la reacción de descomposición del clorato de potasio:



A partir de ella se realizan razonamientos del tipo: por cada dos moles que se descomponen de clorato de potasio se forman dos moles de cloruro de potasio y tres moles de oxígeno; y en función de una cantidad genérica x de moles: por cada $2x$ que disminuye el número de moles de clorato de potasio, aumenta en $2x$ el número de moles de cloruro de potasio y aumenta en $3x$ el de oxígeno.

Resulta conveniente expresar este razonamiento a través del planteo ICF (Inicial, Cambio, Final), por ejemplo si se parten sólo de 6 moles de clorato:

	$2\text{KClO}_3(\text{s}) \rightarrow 2\text{KCl}(\text{s}) + 3\text{O}_2(\text{g})$		
Inicial (mol):	6	0	0
Cambio (mol):	$-2x$	$+2x$	$+3x$
Final (mol):	$6-2x$	$0+2x$	$0+3x$

La situación final no es, necesariamente, cuando la reacción se completa, dado que se puede realizar el seguimiento de las cantidades presentes en cualquier momento del proceso.

El método de simulación que se propone consiste en asignar un rango de posibles valores de x empleando la barra de desplazamiento en una hoja de cálculo y, sobre la base de las relaciones estequiométricas, determinar las cantidades de los reactivos y productos en cualquier momento de la reacción. Se construye una simulación como se muestra en la Figura 1.

	A	B	C	D	E
1					
2		$2\text{KClO}_3(\text{s}) \rightarrow 2\text{KCl}(\text{s}) + 3\text{O}_2(\text{g})$			
3					
4			x		
5			0,5		
6					
7			KClO_3	KCl	O_2
8			6,00	0,00	0,00
9			$(-2x)$	$(+2x)$	$(+3x)$
10			-1,00	1,00	1,50
11			5,00	1,00	1,50
12					
13		<input type="text" value="50"/>			
14			50		

Figura 1: Simulación estequiometría con moles. Las operaciones realizadas son: celda C5: $=C14/100$, celda C10: $=-2*C5$, celda D10: $=2*C5$, celda E10: $=3*C5$, celda C11: $=C8+C10$,

celda D11: =D8+D10, celda E11: =E8+E10.

Para insertar la barra de desplazamiento por ejemplo en el programa Excel versión 2007 se procede de la siguiente manera, con *Botón de Office, Opciones de Excel, Personalizar, Comandos más utilizados, Ficha del programador, Insertar controles, Agregar, Aceptar*. Con ello aparece en la parte superior de la pantalla (barra de herramientas de acceso rápido) un ícono de *Insertar controles*. Las barras de desplazamiento se insertan desde esa barra: *Insertar controles, Controles de formulario, Barra de desplazamiento*.

Una vez insertada la barra de desplazamiento debajo del cuadro ICF, sobre ella y con el botón derecho del mouse se abre *Formato de control, Control* y se completa *Valor mínimo, Valor máximo, Incremento y Vincular con la celda*, como se muestra en la Figura 2.

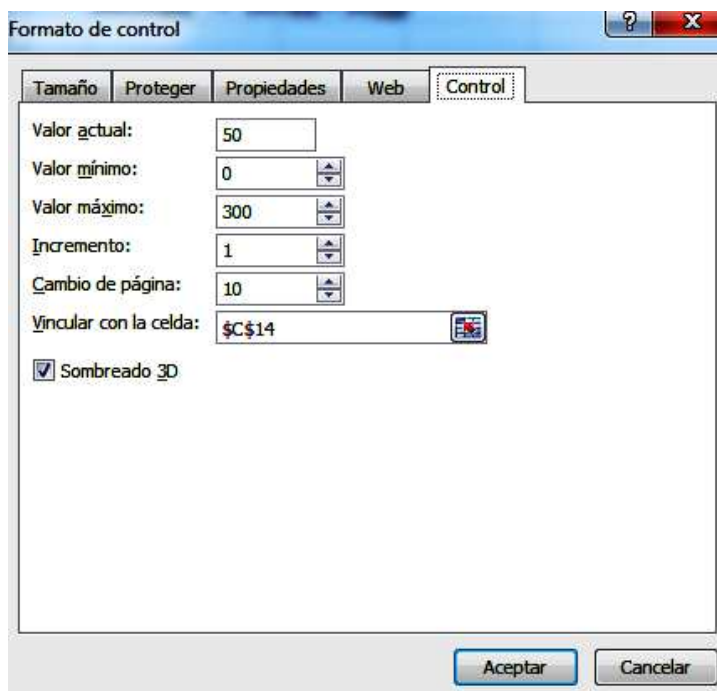


Figura 2: Cuadro de diálogo para dar formato a la barra de desplazamiento.

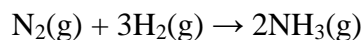
Dado que como valor mínimo no se puede insertar números decimales, en la celda C5 aparece el valor de x como resultado de la operación de dividir el valor asignado con la barra (celda C14) por 100. De esta forma x puede variar en 0,01 desde 0 hasta 3. En otras simulaciones, y en función de optimizar sus resultados, puede ser necesario dividir por un número distinto a 100 al valor asignado por la barra, incluso modificar el valor máximo asignado.

En la Figura 1 se aprecia que cuando el número asignado por la barra es 50, x vale 0,5; se descompone un mol de clorato y el número de moles de las especies en ese momento son respectivamente 5, 1 y 1,5. Nótese que el valor máximo asignado en el formato de control de la barra es 300 de modo de no tener valores negativos y postergar la discusión de este aspecto para más adelante al profundizar los conceptos de reactivo limitante y en exceso.

Algunas posibles preguntas a formular: ¿Cuántos moles de los productos se produjeron cuando se consumieron 2 moles del reactivo? ¿Cuántos moles de oxígeno se formaron cuando quedan 1,5 moles de clorato de potasio? ¿Cuáles son las cantidades

máximas de productos que se formarán?

Una vez que se presentó la simulación anterior, o se construyó en conjunto con los estudiantes, y luego de aplicarla en la resolución de distintas situaciones, se puede solicitar a los estudiantes que construyan una para otra reacción química, por ejemplo para la reacción de síntesis del amoníaco.



La simulación anterior se puede ampliar logrando un mayor impacto visual con la incorporación de un gráfico de columnas, que se modificará automáticamente al desplazar el cursor de la barra de desplazamiento. Las cantidades presentes en distintos momentos de la reacción se pueden visualizar a través del gráfico de columnas. En la Figura 3 se da respuesta a la pregunta: ¿Qué cantidades están presentes cuando la cantidad de reactivo se redujo a la mitad?

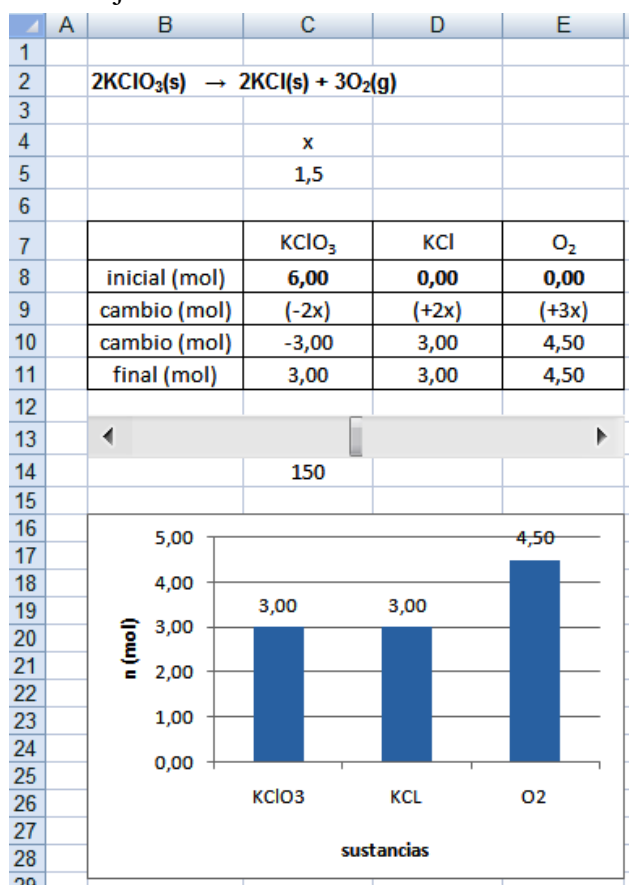


Figura 3. Simulación estequiometría con moles y gráfico asociado

La simulación permite introducir cantidades iniciales de las tres sustancias y calcular automáticamente las cantidades presentes en un momento determinado. Para diferenciar los “datos de entrada” de estas simulaciones, las cantidades experimentales de partida se escriben con letra negrita.

Respecto al abordaje de las concepciones alternativas mencionadas, es oportuno que el docente discuta con los estudiantes los valores numéricos que la simulación permite individualizar y hacer hincapié en las diferencias entre de las cantidades de moles iniciales, los coeficientes estequiométricos y las cantidades finales. Resaltar que los coeficientes estequiométricos de los reactivos no son las cantidades iniciales de la reacción, que el reactivo de menor coeficiente estequiométrico no es necesariamente el reactivo limitante, que la reacción ocurrirá igual aunque las cantidades iniciales en

moles de los reactivos sean inferiores a los coeficientes estequiométricos.

2. Estequiometría con volúmenes

La simulación anterior (Figura 1) se puede modificar de forma tal que automáticamente calcule el volumen de oxígeno obtenido y responda a preguntas del tipo: ¿Qué volumen de oxígeno se obtiene en condiciones estándar cuando se descomponen dos moles de clorato de potasio? ¿Qué volumen se obtendrá si la presión es 0,9 atm y la temperatura 25 °C?

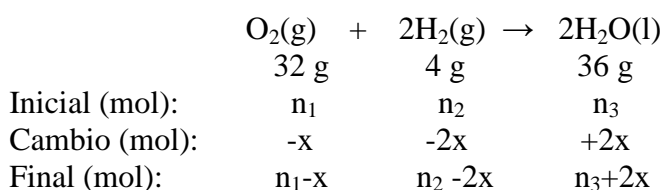
Considerando al oxígeno como un gas ideal y aplicando la ecuación $V = nRT/P$, en la Figura 4 se da respuesta a la primera pregunta, cuando la presión es 1 atm y la temperatura 0 °C (273 K).

	A	B	C	D	E
1					
2		$2\text{KClO}_3(\text{s}) \rightarrow 2\text{KCl}(\text{s}) + 3\text{O}_2(\text{g})$			
3					
4			x		
5			1		
6					
7			KClO ₃	KCl	O ₂
8		inicial (mol)	6,00	0,00	0,00
9		cambio (mol)	(-2x)	(+2x)	(+3x)
10		cambio (mol)	-2,00	2,00	3,00
11		final (mol)	4,00	2,00	3,00
12					
13		◀ ▶			
14			100		
15					
16		R	T	P	Volumen O ₂
17		atm.L/K.mol	K	atm	L
18		0,082	273	1	67,2
19					

Figura 4. Simulación estequiometría con cálculo de volúmenes. Se agrega la operación: celda E18: =E11*B18*C18/D18.

3. Estequiometría con masas

Una aplicación similar a la simulación de la Figura 3 se puede realizar con relaciones estequiométricas en gramos. Supongamos la reacción de formación de agua a partir de sus sustancias elementales: hidrógeno y oxígeno. La relación estequiométrica nos dicen que 32 g de oxígeno reaccionan con 4 g de hidrógeno para obtener 36 g de agua. Se realiza el planteo ICF como:



La simulación de la Figura 5 permite dar respuesta rápidamente a preguntas del tipo:

¿Cuántos gramos de agua se producen con 10 g de oxígeno y suficiente hidrógeno?
 ¿Cuál es el reactivo limitante si se mezclan inicialmente 40 g de oxígeno y 30 g de hidrógeno? ¿Cuál es la cantidad de reactivo en exceso? ¿Qué cantidad máxima de agua (rendimiento teórico) se obtiene? En la Figura 5 se aprecia que cuando la masa final de oxígeno es cero, las respectivas de hidrógeno y agua son 25 g y 45 g.

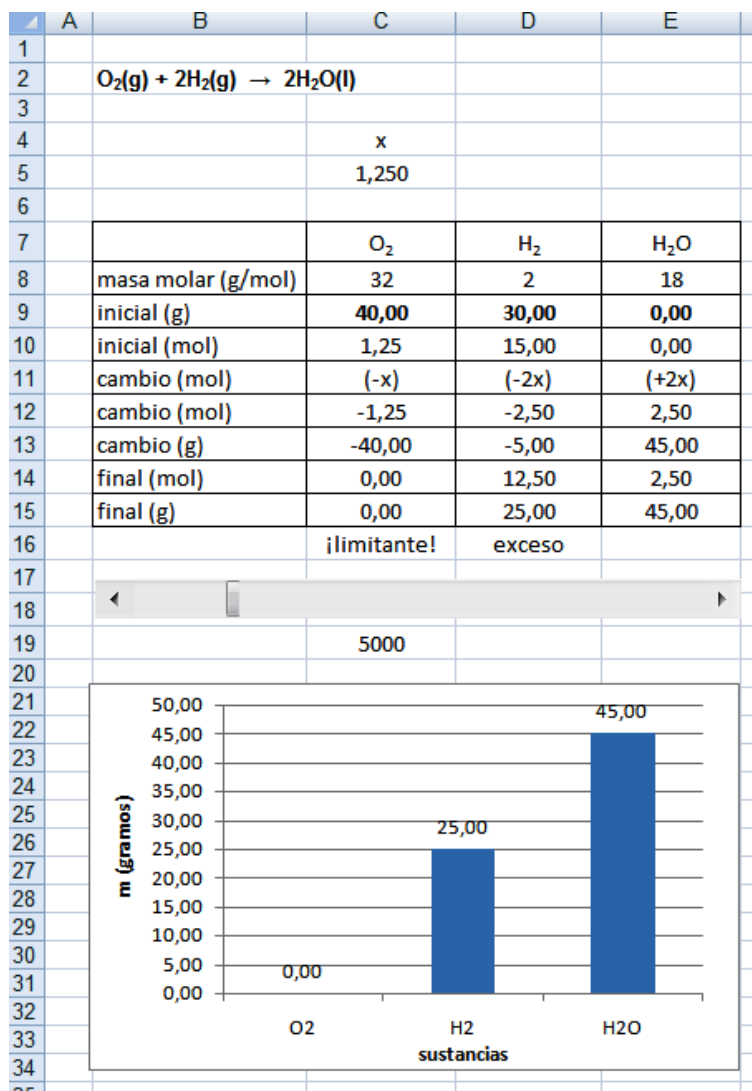


Figura 5. Simulación estequiometría con masas. Las operaciones realizadas son: celda C5: =C19/4000, celda C10: = C9/C8, celda D10: =D9/D8, celda E10: =E9/E8, celda C12: = -C5, celda D12: =-2*C5, celda E12: =2*C5, celda C13: =C12*C8, celda D13: =D12*D8, celda E13: =E12*E8, celda C14: =C10+C12, celda D14: =D10+D12, celda E14: =E10+E12, celda C15: =C14*C8, celda D15: =D14*D8, celda E15: =E14*E8, celda C16: =SI((C15)<=0;"¡limitante!";"exceso"), celda D16: =SI((D15)<=0;"¡limitante!";"exceso").

Esta simulación se ha ampliado utilizando la función SI, para que aparezcan mensajes (que hacen mención a los resultados obtenidos en celdas contiguas) como: "limitante", "exceso". Así, cuando la masa de alguno de los reactivos es cero (o tiene un valor negativo) cambia automáticamente el rótulo de "exceso" por "limitante".

¿Qué ocurre si la cantidad inicial de hidrógeno es 60 g? Al introducir este valor como dato de partida se aprecia que cuando la reacción se completa, se obtiene la misma cantidad de agua y queda una masa de 55g del reactivo en exceso.

Para responder a la pregunta: ¿Cuántos gramos de oxígeno faltarían para que reaccione totalmente el hidrógeno? basta con llevar la cantidad de hidrógeno a cero y apreciar que en la celda de la masa final de oxígeno figura “-200” g. Para interpretar este valor será necesario discutir con los estudiantes el significado que se otorga a estas cantidades negativas: “la cantidad que falta”.

La simulación de la Figura 5 establece las correspondencias entre moles y gramos para las tres situaciones: inicial, cambio y final. Esta simulación puede simplificarse expresando sólo las cantidades en gramos (Figura 6). El usuario puede optar entre estas dos o algún desarrollo intermedio.

	A	B	C	D	E
1					
2		$O_2(g) + 2H_2(g) \rightarrow 2H_2O(l)$			
3					
4			x		
5			1,250		
6					
7			O ₂	H ₂	H ₂ O
8		masa molar (g/mol)	32	2	18
9		inicial (g)	40,00	30,00	0,00
10		cambio (g)	-40,00	-5,00	45,00
11		final (g)	0,00	25,00	45,00
12			¡limitante!	exceso	
13		<input type="text" value="5000"/>			
14					
15			5000		

Figura 6. Simulación simplificada estequiometría con masas. Las operaciones realizadas son: celda C5: =C15/4000, celda C10: -C5*C8, celda D10: =-2*C5*D8, celda E10: =2*C5*E8, celda C11: =C9+C10, celda D11: =D9+D10, celda E11: =E9+E10.

Como una actividad de aplicación se puede solicitar a los alumnos que modifiquen la primera hoja de cálculo para la reacción de descomposición de 500 g de clorato de potasio.

Por último, puede incorporarse a esta simulación el cálculo del porcentaje de rendimiento agregando dos celdas más, una con el rendimiento real (como dato de partida) y otra con el cálculo del porcentaje de rendimiento. Con ella se da respuesta a la pregunta: ¿Cuál es el rendimiento porcentual en la reacción de 40 g de oxígeno y 30 g de hidrógeno si se obtuvieron 42 g de agua?

4. Estequiometría con concentraciones

En una etapa posterior, se pueden abordar problemas de estequiometría con disoluciones, por ejemplo para responder a preguntas como: ¿Cuántos moles de sal se obtienen en la neutralización de 200 mL de hidróxido de sodio 2,0 M con 150 mL de ácido sulfúrico 2,0 M? ¿Cuál es el reactivo limitante y el reactivo en exceso? Cuyas respuestas pueden obtenerse desde la simulación con la barra de desplazamiento de la Figura 7.

	A	B	C	D	E
1					
2		$2\text{NaOH}(\text{ac}) + \text{H}_2\text{SO}_4(\text{ac}) \rightarrow \text{Na}_2\text{SO}_4(\text{ac}) + 2\text{H}_2\text{O}(\text{l})$			
3					
4			x		
5			0,2		
6					
7			NaOH	H ₂ SO ₄	Na ₂ SO ₄
8		volumen (L)	0,200	0,150	0,000
9		concentración (M)	2,0	2,0	0,0
10		inicial (mol)	0,40	0,30	0,00
11		cambio (mol)	(-2x)	(-x)	(+x)
12		cambio (mol)	-0,40	-0,20	0,20
13		final (mol)	0,00	0,10	0,20
14		¡limitante! exceso			
15		<input type="text" value=""/>			
16					
17					
18			40		

Figura 7: Simulación de estequiometría con concentraciones. Las operaciones realizadas son: celda C5: =C18/200, celda C10: =C9*C8, celda D10: =D9*D8, celda E10: =E9*E8, celda C12: =-2*C5, celda D12: =-C5, celda E12: =C5, celda C13: =C10+C12, celda D13: =D10+D12, celda E13: =E10+E12, celda C14: =SI((C13)<=0;"¡limitante!";"exceso"), celda D14: =SI((D13)<=0;"¡limitante!";"exceso").

La simulación propuesta permitiría hallar la composición del sistema en el caso en el que se halle una cierta cantidad de sal en la situación inicial.

CONCLUSIONES

Se ha presentado una forma diferente de abordar y resolver problemas químicos a partir del empleo la barra de desplazamiento en el contexto de la hoja de cálculo. Cuyo resultado final es una simulación dinámica y versátil, de entorno visual agradable que permite formular y responder preguntas del tipo “¿qué pasa si...?”.

La propuesta desarrollada hace hincapié en aspectos conceptuales de estequiometría por sobre la resolución rutinaria de ejercicios numéricos. Los estudiantes haciendo uso de las relaciones estequiométricas que se establecen entre todas las sustancias (reactivos y productos) construyen una simulación numérica que les permite hallar la composición del sistema a medida que avanza la reacción, partiendo de las condiciones iniciales.

En otro artículo (Raviolo, 2002b) se han mostrado los resultados de la experiencia didáctica realizada con hojas de cálculo en primer año de la universidad, resaltando sus ventajas con respecto a la enseñanza tradicional y el cambio positivo de actitudes hacia el aprendizaje de la química y hacia las TIC evidenciado por los alumnos.

La formulación del planteo Inicial, Cambio y Final es de gran relevancia conceptual, dado que ayuda a identificar la composición en distintos momentos de la reacción y a diferenciarla de la relación estequiométrica. El profesor puede orientar las preguntas de modo de verificar la presencia o superación de las dificultades o concepciones alternativas mencionadas en la introducción.

El archivo con las simulaciones desarrolladas en este artículo pueden ser solicitadas al autor por correo electrónico.

BIBLIOGRAFIA

- ARASASINGHAM, R.; TAAGEPERA, M.; POTTER, F. & LONJERS, S., Using knowledge space theory to access student understanding of stoichiometry, *Journal of Chemical Education*, **81**, 1517-1523, 2004.
- COLLINS, F. & WILLIAMS, C., Management of first-year chemistry laboratories using spreadsheets. *Journal of Chemical Education*, 1995, **72**, A182-A183, 1995.
- FRAZER, M. & SERVANT, D., Aspects of stoichiometry, where do students go wrong? *Education in Chemistry*, **24**, 73-75, 1987.
- GAUCHON, L. & MÉHEUT, M., Learning about stoichiometry: from students' preconceptions to the concept of limiting reactant, *Chemistry Education Research and Practice*, **8** (4), 362-375, 2007.
- HUDDLE, P. & PILLAY, A., An in-depth study of misconceptions in stoichiometry and chemical equilibrium at a South African University, *Journal of Research in Science Teaching*, **23** (1), 65-77, 1996.
- MITCHELL, I. & GUSTONE, R., Some student conceptions brought to the study of stoichiometry, *Research in Science Education*, **14**, 78-88, 1984.
- PINTO, G. & LEÓN, S., Estequiometría i vida cotidiana, *EduQ*, **3**, 29-36, 2009.
- RAVIOLO, A., Hojas de cálculo en clases de ciencias: 1. Introducción. 2. Algunos ejemplos del curso de Química, *Revista de Educación en Ciencias*, **3** (2), 100-102, 2002a.
- RAVIOLO, A., La hoja de cálculo en la enseñanza de las ciencias: experiencia didáctica en química universitaria, *Revista de Educación en Ciencias*, **3** (2), 80, 2002b.
- RAVIOLO, A., Las imágenes en el aprendizaje y en la enseñanza del equilibrio químico. *Educación Química*, **17** n° extraordinario, 300-307, 2006.
- RAVIOLO, A., Enseñanza de la química con la hoja de cálculo, *Educación Química*, **22** (4), 357-362, 2011.
- RAVIOLO, A., Re-creando simulaciones con la hoja de cálculo, *Educación Química*, **23** (1), 11-15, 2012a.
- RAVIOLO, A., Using a spreadsheet scroll bar to solve equilibrium concentrations, *Journal of Chemical Education*, **89**, 1411-1415, 2012b.
- RAVIOLO, A. & LERZO, G., Analogías en la enseñanza de la estequiometría: revisión de páginas web, *Revista Electrónica de Investigación en Educación en Ciencias*, **9** (2), 28-41, 2014.
- ROSENBERG, R., The spreadsheet, *Journal of Chemical Education*, **62**, 140-141, 1985.
- VAN HOUTEN, J., Chemistry on a spreadsheet, *Journal of Chemical Education*, **65**, A314-A315, 1988.
- ZIELINSKI, T. & SWIFT, M. (editors), *Using computers in chemistry and chemical education*, Washington: American Chemical Society, 1997.