

# USO DE UNA HOJA DE CÁLCULO COMO UNA ESTRATEGIA DIDÁCTICA EN LA ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA DE LOS EQUILIBRIOS IÓNICOS EN SOLUCIÓN

José Guerrero Alves

Olga Marval de Barrios

Ayuramy Martínez

Universidad Rómulo Gallegos

San Juan de los Morros, Estado Guárico-Venezuela

## RESUMEN

La tendencia en las nuevas tecnologías de la informática, como estrategias didácticas en Educación, parece orientada al desarrollo de aplicaciones para INTERNET. Algunas tecnologías (hojas de cálculo), no orientadas totalmente a la red, permiten abordar problemas difíciles en química sin recurrir a complejos lenguajes de programación. El objetivo de trabajo fue desarrollar una estrategia didáctica en hoja de cálculo y resolver teóricamente el sistema  $\text{KH}_2\text{PO}_4\text{-CaCO}_3$  en agua (obtener todas las concentraciones de las especies en solución), para explicar parcialmente el comportamiento de fertilizantes fosfatados en suelos calcáreos. Las ecuaciones del sistema fueron condensadas en un polinomio de grado 7 para la actividad de ion hidrógeno y resuelto mediante el método de Newton-Raphson. La hoja de cálculo, en conjunto, permite almacenar las constantes químicas utilizadas, determinar las concentraciones de todas las especies en solución por procesos iterativos para el pH y la fuerza iónica, regular las fases precipitadas ( $\text{CaCO}_3$  e hidroxiapatita) y controlar la calidad operacional del proceso con base en los balances de carga y masa para el  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  y el  $\text{KHCO}_3$  (formado en un ambiente con  $\text{CaCO}_3$ ). Los resultados teóricos fueron verificados experimentalmente, para una solución 0,01 M de  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ , antes y después de añadirle un exceso de  $\text{CaCO}_3$ .

**Palabras Clave:** Método de Newton-Raphson, nuevas tecnologías educativas, sistemas químicos complejos

## USE OF SPREADSHEET SOFTWARE AS A DIDACTIC STRATEGY IN TEACHING OF THE CHEMISTRY OF IONIC EQUILIBRIUMS IN SOLUTION

## ABSTRACT

The tendency in the use of new information technologies, as didactic strategies in education, seems to be focused on the development of Internet applications. Some technologies (spreadsheet software), not totally Web oriented, can be used to solve difficult problems in chemistry without employing complex software languages. The objective of this study was to develop a didactic strategy in a spreadsheet for theoretical resolution of  $\text{KH}_2\text{PO}_4\text{-CaCO}_3$  system (to obtain all concentrations for chemical species in aqueous solution) and partially explain the behavior of

phosphate fertilizers in calcareous soils. System equations were condensed in a 7<sup>th</sup> grade polynomial equation for hydrogen activity and its resolution was accomplished using the Newton-Raphson method. The developed spreadsheet used chemical constants and the procedures for: a) determining concentrations for all chemical species in aqueous solution by iterative processes for pH and ionic strength; b) regulating the precipitated phases ( $\text{CaCO}_3$  and hydroxyapatite); and c) controlling the operational quality based in the charge and mass balances for  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  and  $\text{KHCO}_3$  (formed in an environment with  $\text{CaCO}_3$ ). Theoretical results were experimentally verified for a 0.01 M  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  solution, before and after adding  $\text{CaCO}_3$  in excess.

**Key Words:** Newton-Raphson method, new educational technologies, complex chemical systems

### El Problema

Antes de la popularización de las computadoras personales en el ámbito educativo, la experiencia en el aula de clase para el estudio de los equilibrios iónicos en solución más sencillos era el de asumir aproximaciones razonables (Butler, 1968) en una o varias de las ecuaciones simultáneas que definían el sistema (balance de cargas, balance de masas, condición protónica). El propósito era el de obtener, por sustitución, un polinomio de grado no mayor que 2 en la concentración de alguna especie del sistema porque este polinomio, el caso más complejo, podría ser resuelto algebraicamente mediante la fórmula de la ecuación de segundo grado (equivalente a obtener la raíz con sentido químico). Sin embargo, algunos sistemas naturales muy importantes en los cuales intervienen ácidos polipróticos ( $\text{H}_2\text{CO}_3$  y  $\text{H}_3\text{PO}_4$ ), podrían ser difíciles de considerar rigurosamente con la técnica de las aproximaciones razonables porque necesariamente habría que encontrar las raíces de polinomios con grado mayor que 2. No existen fórmulas algebraicas que permitan realizar esta tarea y, por tanto, hay que recurrir a los métodos numéricos.

La utilización manual de los métodos numéricos para encontrar las raíces de un polinomio, aún con la asistencia de una calculadora de bolsillo (una posible situación en la evaluación de estos contenidos en el aula de clases), podría convertirse en un proceso tedioso porque se basa en aproximaciones sucesivas a la solución final a partir de un valor inicial de prueba. Teóricamente, encontrar las raíces de un polinomio de grado  $n$ , involucraría encontrar  $n$  raíces y se podrían presentar múltiples posibilidades. Sin embargo, a pesar de esta multiplicidad de raíces, el que pretende resolver un sistema químico relativamente complejo sólo está interesado en encontrar una de ellas: la que tiene significado químico para ese sistema particular. En las aplicaciones químicas, se requiere cierta experiencia para escoger adecuadamente el valor inicial de prueba porque algunos resultados podrían contravenir el sentido común o la intuición propia de los que pretenden aprender una técnica, viéndose de pronto inmersos en una situación incomoda porque el proceso iterativo no converge rápidamente a la solución deseada. Esto no tiene ninguna relación con la competencia en química del sujeto cognoscente.

El inicio en el uso de los métodos numéricos en el ámbito universitario generalmente es asistido por computadora y el estudiante tiene que programar el algoritmo en la sintaxis propia de algún lenguaje de programación. Normalmente, estos contenidos se dictan en el marco de una asignatura de programación y muchos de los ejemplos utilizados en la determinación de las raíces de polinomios son tomados de sistemas ideales en los cuales intervienen polinomios con coeficientes

enteros; aunque sus raíces no necesariamente serían números enteros. Pueden ser números racionales, reales e incluso imaginarios. Como las computadoras operan a muy alta velocidad, es prácticamente irrelevante que el estudiante tenga experiencia para escoger adecuadamente el valor inicial de prueba; a menos que el docente esté interesado en estudiar algún problema de difícil convergencia (Chapra y Canale, 2001) en torno a alguna o algunas raíces particulares de cierto sistema. Como los cursos de programación casi siempre son electivos para los estudiantes de pregrado en el área de las Ciencias Agrícolas, el contacto con los métodos numéricos quedaría fuera del alcance del grueso de la población estudiantil que podría tener la creencia generalizada de que son particularmente difíciles de aprobar.

El paradigma actual de la programación de computadoras parece ser el Orientado a Objetos y ha logrado que las grandes compañías dedicadas a la producción de software desarrollen programas con interfaces gráficas que permiten a los usuarios la interacción “amigable” con las computadoras (a través de sistemas de menús, barras de herramientas y ventanas) sin tener ningún conocimiento previo de programación. Uno de estos programas particularmente útiles son las llamadas “hojas de cálculo” porque pueden ser instrumentadas para desarrollar algunos de los algoritmos propios de los métodos numéricos sin necesidad de escribir ninguna línea de código en lenguaje de programación. La tendencia actual en Venezuela parece ser la de familiarizar a los estudiantes con el uso de computadoras prácticamente desde la educación básica. En las áreas administrativas de las empresas y universidades personas que no tienen necesariamente un grado universitario usan comúnmente hojas de cálculo. Esto indica que no se requeriría una calificación especial para ello y permite sugerir que las hojas de cálculo podrían ser usadas incluso en los primeros cursos de la enseñanza de la química y de las ciencias en general.

Fundamentado en los planteamientos anteriores y con el propósito de explicar parcialmente el comportamiento de fertilizantes fosfatados en suelos calcáreos, se desarrolló una estrategia didáctica, con base en una hoja de cálculo, para la consideración del sistema  $\text{KH}_2\text{PO}_4\text{-CaCO}_3$  en agua que permitiera encontrar la raíz con significado químico de un polinomio de grado 7 para la actividad de ion hidrógeno ( $\text{H}^+$ ) y además, la concentración de todas las especies químicas en solución acuosa.

Se espera que la estrategia también permita el desarrollo de la capacidad de los individuos para: a) reforzar las habilidades algebraicas básicas de despeje al obtener el polinomio de grado 7. b) organizar una hoja de cálculo para realizar estimaciones exactas de concentraciones de iones en solución, la cual puede servir de base para introducir los conceptos de programación estructurada, cálculos iterativos y valores de prueba aunque en este proceso no se programa en un sentido estricto. c) validar experimentalmente los resultados teóricos con base en una experiencia sencilla de laboratorio.

### **Sobre las Herramientas Informáticas y Telemáticas y la Instrucción**

En los últimos tiempos prácticamente todos los discursos que aluden al campo de la educación señalan la necesidad de un cambio. La constante preocupación de los investigadores estriba en la lentitud con la cual este se viene produciendo, en especial en el ámbito de la educación superior, con una marcada resistencia al cambio de las actividades de enseñanza. Sin embargo, algunos autores coinciden en señalar que a medida que las tecnologías de la información y la telemática se han ido desarrollando, se han estimulado nuevos paradigmas de acceso y de administración de la instrucción

(Bates, 1993; Perrault, 1993). Es una realidad que el uso extendido que han tenido las nuevas tecnologías de la información se manifiestan en tres grandes vertientes de empleo: procesamiento de la información, interacción y comunicación (Chacón, 1992).

Según Stojanovic (2001), la primera vertiente del procesamiento de la información incluye procesadores numéricos, de palabras, auxiliares de sistemas gráficos, sistemas manejadores de bases de datos, sistemas de autoedición, hojas de cálculo ampliadas y sistemas integrados. Su función pedagógica consiste en la diseminación de información, aprendizaje de idiomas, aprendizaje de solución de problemas y desarrollo de habilidades verbales, de procedimiento, analíticas, de presentación y de expresión artística; entre otras. Por otro lado, la función de la interacción como vertiente es la ejercitación y la práctica, presentación de información, enseñanza con tutoría, solución de problemas, juegos, simulaciones, aprendizaje heurístico y aprendizaje de procedimientos. Esta vertiente está relacionada con lo referido a la evaluación sistematizada, instrucción asistida por computadora, videos interactivos, hipermedios, realidad virtual y multimedios interactivos inteligentes. Finalmente, la comunicación como vertiente incluye a los bancos de información interactivos, correo electrónico y sistemas de conferencia y de comunicación multimedios por computadora. Su función pedagógica es el aprendizaje de información verbal, desarrollo de expresión, desarrollo de habilidades para el análisis y síntesis del texto, desarrollo de juicio crítico y solución participativa de problemas (Stojanovic, 2001).

Al analizar la realidad del uso extendido que han tenido las nuevas tecnologías de la información en todas sus vertientes de empleo, Stojanovic (2001) plantea que el integrar las nuevas tecnologías de la información y de la comunicación ha involucrado también incorporarlas a un nuevo enfoque de enseñanza caracterizado por estar centrado en el que aprende. Ello supone proveer experiencias de aprendizaje auténtico que permitan trascender el esquema clásico y centrado en el docente. Esta incorporación a un enfoque más constructivo del aprendizaje se debe fundamentalmente a que las nuevas tecnologías de la comunicación y de la información han sido orientadas fundamentalmente hacia la solución de problemas. Diversas investigaciones reportan resultados alentadores respecto a su uso, entre otros, mayores niveles de satisfacción que con actividades tradicionales y mayor nivel de desarrollo de pensamiento crítico y de solución de problemas (Bruce *et al.*, 1993; Harasin, 1993; Burge y Collins, 1995).

### **Uso de las Hojas de Cálculo: Antecedentes**

Existen numerosos ejemplos de uso de las hojas de cálculo como instrumento para facilitar la resolución de problemas matemáticos, así como, aplicados a la química y otras disciplinas. Ledanois *et al.* (2000) utilizan hojas de cálculo, por ejemplo, para determinar una exponencial mediante un desarrollo en serie de potencias. Aprovechan la capacidad de este tipo de herramienta para copiar líneas enteras y así reproducir una secuencia de cálculo. Este procedimiento es equivalente a los “bucles” (“loops” en inglés) que se emplean en las rutinas de programación para los cálculos iterativos. Además, en un ejemplo más aplicado, resuelven la ecuación de Laplace para una barra metálica lineal sometida a una diferencia de temperaturas, mediante una aproximación de diferencias finitas y una secuencia iterativa de cálculos basados en el método de Gauss-Seidel. El procedimiento es extraordinariamente sencillo e ilustrativo.

Por otra parte, Chapra y Canale (2001) también utilizan hojas de cálculo para resolver, mediante métodos numéricos, ecuaciones diferenciales ordinarias en un problema de estimación de

parámetros para una cinética de reacción química. En otro tipo de aplicaciones, también utilizan esta herramienta para desarrollar soluciones simples para ecuaciones diferenciales en derivadas parciales elípticas (ecuación de Poisson), correspondientes a una placa metálica con un extremo inferior aislado y una fuente de calor.

Grafton y Todd (2003) emplean las hojas de cálculo, utilizando técnicas propias o especialmente diseñadas por los desarrolladores del software (Excel), en la consideración de problemas de la biología. Suma, resta, multiplicación e inversión de matrices, son aprovechadas en la resolución de sistemas lineales (incluyendo sistemas con restricciones) y son algunas de las aplicaciones útiles que pueden ser manipuladas en situaciones de regresión lineal simple o múltiple o en cualquier otro tipo de regresión, así como, empleando programación lineal. Otro tipo de herramientas, como derivación e integración numérica, también son considerados.

Coleman (1998), en una página Web del Wellesley College (Massachusetts, Estados Unidos de América), desarrolla una lista de hojas de cálculo muy extensa y pormenorizada, orientadas a la enseñanza de la química y la estadística. Estas hojas de cálculo incluyen, entre otros, procedimientos para obtener diagramas de distribución para la formación de complejos metálicos, ejemplificar los fenómenos relativos a la radiación de cuerpo negro y el efecto fotoeléctrico, determinar el espectro de emisión del átomo de hidrógeno, la carga nuclear efectiva y las funciones de distribución radial para el átomo o la termodinámica de la disociación del  $N_2O_4$ . Curvas de titulación, con hidróxido de sodio, para ácidos monopróticos (débiles o fuertes) y ácidos polipróticos (hasta con cuatro protones ácidos) también son considerados. No obstante, aunque se reconoce que estas hojas de cálculo son importantes en el proceso de enseñanza aprendizaje porque el estudiante puede variar a su antojo los parámetros de entrada y observar que efectos tienen sobre las salidas (algunas de forma gráfica), para así estudiar los factores que influyen sobre un determinado fenómeno, se observa que aparentemente fueron creadas con una filosofía de “caja negra” y más bien reflejan la capacidad y el dominio de la materia por parte del profesor que las elaboró y no las del estudiante.

Este vistosísimo despliegue de habilidad y técnica para elaborar hojas de cálculo, muy impactantes desde el punto visual, tal vez tenga su origen en la captación de la atención y el interés por parte del estudiante. En relación con el proceso de enseñanza-aprendizaje de la Química, en los diversos niveles educativos, Pinto (2004) señala que este encuentra cierta dificultad porque se requiere una construcción mental capaz de relacionar la estructura microscópica (recogida en conceptos como átomo, mol, enlace, electrones, etc.) y el comportamiento macroscópico de las sustancias (aspecto, propiedades, etc.), mediante un lenguaje (conceptos científicos y la propia nomenclatura química) que además, suele resultar extraño, tanto para los alumnos de las materias relacionadas como para el conjunto de la ciudadanía.

Durante la I Jornada sobre Didáctica de la Química y Vida Cotidiana, celebrada el 29 de Mayo de 2003 en Madrid, participaron con trabajos 126 autores de Universidades, Centros de Enseñanza Secundaria y otras Instituciones de casi toda la geografía española y de un conjunto de ocho países. Los trabajos presentados fueron resumidos en un libro auspiciado por la Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología donde se recogen ideas, ejemplos y experiencias para fomentar el aprendizaje de la Química y mostrando cómo esta Ciencia está involucrada en múltiples aspectos de la vida cotidiana. El evento pretendió cubrir un amplio espectro de perspectivas entre las cuales se señalan: fundamentos y proyectos educativos, recursos didácticos relativos a experimentos y ejemplos, simulaciones y analogías, química en acción y misceláneos.

Sólo dos trabajos (Fernández y Prieto, 2003; Prieto y Fernández, 2003) de la referida Jornada hacen referencia al uso de las computadoras en la compresión de problemas. Sin embargo, uno de ellos lo hace en aspectos no relacionados directamente con la química sino con la estadística (Prieto y Fernández, 2003). Por otra parte, en la consideración de los equilibrios químicos, sólo se presentó un trabajo (Gómez *et al.*, 2003) con un enfoque cuantitativo y lo hace según una de las maneras clásicas, es decir, empleando diagramas dibujados en papel y no mediante el empleo de computadoras. Llama la atención que dos de los trabajos mencionados anteriormente (Gómez *et al.*, 2003; Prieto y Fernández, 2003) están contemplados en la sección de misceláneos, es decir, no clasificados en categorías específicas. Por otra parte, también se observaron, en muy pocos artículos, descripciones y aproximaciones cualitativas al tema del equilibrio químico (González y González, 2003; Martínez, 2003; Narros *et al.*, 2003; Orozco *et al.*, 2003; Pinto y Rohrig, 2003).

### **Sobre el Sistema Químico a Analizar**

En la formación de los ingenieros agrónomos, la química agrícola es una disciplina fundamental y dentro de ella, los aspectos relativos a la química de los fertilizantes en el suelo son de sumo interés e importancia. Cuando se aplican fertilizantes al suelo estos pasan por una primera fase de disolución (cuando hay agua en suficiente cantidad) y luego interaccionan con otras especies en solución e incluso con la fase sólida del suelo. Son múltiples especies interaccionando y esta complejidad es muy difícil de visualizar haciendo analogías simples con lo que le sucede en agua a una sustancia fertilizante que sólo se disuelve. Es muy común observar en los estudiantes de agronomía el uso de generalizaciones dogmáticas referidas al comportamiento de fertilizantes, que probablemente han sido obtenidas de los libros o transmitidas por profesores, sin que los estudiantes tomen en cuenta el intervalo de validez de tales generalizaciones. Una de estas generalizaciones implica confundir la urea con un fertilizante amónico que tiende a acidificar el suelo, sin embargo, el efecto inicial es totalmente contrario en solución acuosa y puede ser verificado experimentalmente, de una manera rápida y sencilla, con un potenciómetro (pH-metro) o papel indicador universal. Por otra parte, también existe la creencia generalizada que la acidificación del suelo por parte de los fertilizantes amoniacaes y fosfatados es aplicable en todos los casos. En los suelos calcáreos existe una fuente importante de  $\text{CaCO}_3$  que podría neutralizar esta acidez e inclusive, promover reacciones que alcalinicen el medio. Estas consecuencias pueden ser pensadas, modeladas teóricamente y luego comprobadas experimentalmente.

En relación con el  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ , esta es una sal que proviene de la combinación teórica de la base  $\text{KOH}$  y el ácido  $\text{H}_3\text{PO}_4$ . En los laboratorios de análisis se usa generalmente como un estándar primario para las determinaciones de fósforo y, aunque también es una fuente de potasio, es poco probable que se emplee como fertilizante debido a su costo elevado. No obstante, la utilidad del  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  en el estudio de sus sistemas se debe a que el ion  $\text{K}^+$  proviene de una base muy fuerte ( $\text{KOH}$ ) y, por tanto, su comportamiento en solución sería el de un ácido muy débil, es decir, sin hidrólisis apreciable. Esto simplifica el análisis teórico del ion  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$  que es susceptible de ceder dos protones o de hidrolizarse para producir  $\text{H}_3\text{PO}_4$ .

Por otra parte, en los sistemas naturales es muy importante el efecto del  $\text{CO}_2$ . El  $\text{CO}_2$  es un gas producido en la respiración de los seres vivos (y también por las actividades antropogénicas) que al disolverse en agua se comporta como un ácido diprótico débil. En sistemas no tamponados, como

por ejemplo el agua destilada o una solución acuosa de  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ , el  $\text{CO}_2$  puede tener el efecto apreciable de disminuir el pH de la solución. El pH teórico del agua destilada es 7 (neutro), sin embargo, la disolución del  $\text{CO}_2$  atmosférico ( $P = 3,5 \cdot 10^{-4}$  atm) provoca que el pH de equilibrio descienda hasta el valor ácido de 5,63 (Ponnamperuma, 1967). Esto es un incremento de alrededor de 23 veces en la concentración de iones  $\text{H}^+$  sólo atribuible a la disolución del  $\text{CO}_2$  atmosférico.

El  $\text{CaCO}_3$  es una sal poco soluble en agua y, además, una fuente de calcio. Se encuentra en apreciable cantidad en suelos calcáreos. El pH teórico en agua de un exceso de la sal y ausencia de  $\text{CO}_2$  atmosférico es de 9,96 (Nakayama, 1970). Sin embargo, el  $\text{CO}_2$  promueve la disolución del  $\text{CaCO}_3$  y provoca que a la presión parcial del  $\text{CO}_2$  atmosférico ( $3,5 \cdot 10^{-4}$  atm) el pH de equilibrio en agua, con un exceso de la fase sólida, sea de 8,31 (Nakayama, 1970). Cuando se agrega un exceso de  $\text{CaCO}_3$  a una solución de  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ , el calcio podría interactuar con los iones producidos en la disociación del  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$  para formar compuestos aún más insolubles que el  $\text{CaCO}_3$ . Estos compuestos incluyen, entre otros, el fosfato octocálcico y la hidroxiapatita (Lindsay y Moreno, 1960). La hidroxiapatita es más insoluble que el fosfato octocálcico y debería controlar entonces la concentración de calcio en solución. Si ello es así, gran parte del fósforo desaparecería de la solución precipitado como hidroxiapatita y el equilibrio de cargas debería ser restituido por las formas  $\text{OH}^-$ ,  $\text{HCO}_3^-$  y  $\text{CO}_3^{2-}$ . Esto elevaría sustancialmente el pH haciendo que la solución fuese fuertemente alcalina. El proceso sería equivalente a tener una solución de  $\text{KHCO}_3$  en equilibrio con  $\text{CaCO}_3$  y los valores podrían ser superiores a 10 para concentraciones formales del orden de 1 M.

La complejidad anterior sólo podría ser planteada de una manera exacta considerando teóricamente el concepto de actividad, en lugar de concentraciones, para las expresiones correspondientes a las constantes de equilibrio. Sin embargo, el concepto de actividad, aunque se introduce normalmente en los primeros cursos de físico-química y química analítica, rara vez se considera en la resolución de problemas teóricos complejos en el aula de clase porque la obtención de los coeficientes de actividad requiere el conocimiento de la fuerza iónica, un parámetro químico que también es desconocido al inicio. Sin embargo, este problema tiene solución porque se pueden asumir valores iniciales para la fuerza iónica e iterativamente mejorar la determinación simultánea de los coeficientes de actividad y de la fuerza iónica. No obstante, este procedimiento es muy largo y tedioso, además sujeto a posibles equivocaciones, cuando se realiza con una calculadora manual. Por otra parte, el uso de calculadoras manuales sólo emplea precisión sencilla y sería imposible considerar la acción de un equilibrio donde una sustancia tan insoluble como la hidroxiapatita implica manejar una constante de producto de solubilidad ( $K_{ps}$ ) del orden de  $10^{-114}$ .

Por esta razón, los cálculos normalmente se realizan en computadoras y la rutina se programa en algún lenguaje de programación. Aprender a programar una rutina de cálculo, en algún lenguaje como Basic o C++, para describir el sistema  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ - $\text{CaCO}_3$  empleando actividades en lugar de concentraciones, tal vez exija un esfuerzo superior a sólo tomar un curso de programación. No obstante, este proceso de aprendizaje generalmente se complementa cuando el estudiante escoge el estudio de estos sistemas como tema de investigación (conducente a su grado académico). Esto va más allá de lo que podría enseñarse en un curso normal de química analítica o físico-química. Una solución podría ser que el estudiante utilice una aplicación previamente desarrollada por un programador, no obstante, al no involucrarse en su elaboración impide que el proceso de aprendizaje se de en toda su extensión.

Sin embargo, con el uso de las hojas de cálculo, muy populares por sus aplicaciones en el campo administrativo, pueden abordarse problemas complejos desde el punto de vista matemático y químico sin necesidad de programar una rutina de cálculo. Esta sola posibilidad hace que el docente se anime a exigir que los estudiantes obtengan las expresiones que permitan resolver estos problemas complejos y mejoren sus habilidades en la manipulación algebraica de ecuaciones. El proceso siguiente sería como implementar la rutina de cálculo en la hoja para obtener los resultados.

## METODOLOGÍA

La investigación se desarrolló según las siguientes etapas:

1. Arqueo bibliográfico: Esta fase de la investigación consistió en la revisión de materiales bibliográficos (ubicación, localización, selección y posterior análisis) con la finalidad de obtener una aproximación del estado del arte del tema en estudio.
2. Construcción del Modelo teórico a emplear: Para explicar parcialmente el comportamiento de fertilizantes fosfatados en suelos calcáreos se consideró el sistema  $\text{KH}_2\text{PO}_4\text{-CaCO}_3$  en agua, y se empleó una hoja de cálculo que permitiera la resolución teórica de un polinomio de grado 7 para la actividad de ion hidrógeno ( $\text{H}^+$ ). Como extensión particular del caso anterior, también se consideró el sistema  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  en agua simplemente haciendo igual a cero el producto de solubilidad del  $\text{CaCO}_3$ , lo cual produce un polinomio de grado 6. El modelo teórico empleado se construyó por consenso y el procedimiento de cálculo fue conducido de manera independiente por los autores con formación en química. Las discrepancias se analizaron hasta obtener expresiones libres de errores.
3. Planificación de la distribución de la hoja de cálculo. Validación de resultados.

## Descripción de la Experiencia Didáctica

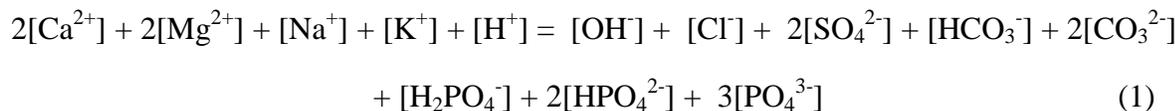
A diferencia de las actividades de enseñanza-aprendizaje tradicionales, en las cuales los participantes se limitan a considerar sistemas acuosos sencillos (quizás sin ningún interés desde el punto de vista agronómico), en esta experiencia se tiene por propósito mediar un aprendizaje integral, el cual abarca diferentes aspectos de la química orientada hacia los problemas agrícolas. Por esta razón, las actividades se han diseñado como una experiencia didáctica en tres etapas:

### **Etapas I: El Modelo Teórico**

La resolución de problemas relativamente sencillos puede involucrar suficiente complejidad cuando se intentan resolver por los métodos convencionales empleando calculadoras de mano. No obstante, problemas más complejos de abordar y por tanto, más difíciles de resolver son los que generalmente tienen que ver con situaciones que se presentan comúnmente en la vida cotidiana. Tal como fue señalado, el modelo teórico se construyó por consenso respecto al procedimiento de cálculo y fue conducido de manera independiente por los autores con formación en química. Las discrepancias se analizaron hasta obtener expresiones libres de errores. De aquí que esta etapa se proponga como vía para inducir en los estudiantes la disposición para el trabajo en equipo y mejorar sus destrezas en la manipulación algebraica de expresiones matemáticas derivadas de la química.

### Desarrollo del modelo para el sistema $\text{KH}_2\text{PO}_4\text{-CaCO}_3$ en agua.

Un posible balance general de cargas para el sistema  $\text{KH}_2\text{PO}_4\text{-CaCO}_3$  en agua corresponde a:



donde los corchetes hacen referencia a concentraciones molares en solución acuosa. Las concentraciones de  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Cl}^-$  y  $\text{SO}_4^{2-}$  se incluyen sólo para generalizar el problema (fuerza iónica no relacionada con el efecto de ion común) y se considera que no producen fases precipitadas.

Las concentraciones de  $\text{H}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{OH}^-$ ,  $\text{HCO}_3^-$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ ,  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$ ,  $\text{HPO}_4^{2-}$  y  $\text{PO}_4^{3-}$  se asumen reguladas por constantes de disociación, ionización o precipitación, las cuales han sido adaptadas de Guerrero *et al.* (2002) y Butler (1968).

$$K_{1c} = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{HCO}_3^-]}{[\text{H}_2\text{CO}_3]} \quad (2)$$

$$K_{2c} = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{CO}_3^{2-}]}{[\text{HCO}_3^-]} \quad (3)$$

$$K_w = [\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-] \quad (4)$$

$$K_s = [\text{Ca}^{2+}] \cdot [\text{CO}_3^{2-}] \quad (5)$$

$$(\text{H}_2\text{CO}_3) = k \cdot P \quad (6)$$

$$k = 0.0344 - 0.0084 \cdot I \quad (7)$$

$$[\text{H}_3\text{PO}_4] = \frac{C1}{1 + \frac{K_{1P}}{r_{11} \cdot r_5 \cdot [\text{H}^+]} + \frac{K_{1P} \cdot K_{2P}}{r_{12} \cdot K_5 \cdot [\text{H}^+]} + \frac{K_{1P} \cdot K_{2P} \cdot K_{3P}}{r_{13} \cdot K_5 \cdot [\text{H}^+]}} \quad (8)$$

$$K_{1P} = \frac{[\text{H}^+] \cdot r_5 \cdot [\text{H}_2\text{PO}_4^-]_1}{[\text{H}_3\text{PO}_4]} \quad (9)$$

$$K_{2P} = \frac{[\text{H}^+] \cdot r_5 \cdot [\text{HPO}_4^{2-}]_2}{[\text{H}_2\text{PO}_4^-]_1} \quad (10)$$

$$K_{3P} = \frac{[\text{H}^+] \cdot r_5 \cdot [\text{PO}_4^{3-}]_3}{[\text{HPO}_4^{2-}]_2} \quad (11)$$

donde  $K_{1C}$  y  $K_{2C}$  corresponden respectivamente a la primera y segunda constante de ionización del  $\text{H}_2\text{CO}_3$ ;  $K_{1P}$ ,  $K_{2P}$  y  $K_{3P}$  definen respectivamente la primera, segunda y tercera constante de disociación del  $\text{H}_3\text{PO}_4$ ;  $K_w$ = constante de autoprotólisis del agua;  $K_5$ = constante del producto de solubilidad del  $\text{CaCO}_3$ ;  $k$ = constante de la ley de Henry para la solubilidad del  $\text{CO}_2$  en agua;  $P$ = presión parcial de  $\text{CO}_2$ ; e  $I$ = fuerza iónica de la solución resultante. Los  $r_1$  hasta  $r_{13}$  hacen referencia a los coeficientes de actividad, respectivamente, para los iones  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{H}^+$ ,  $\text{OH}^-$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{HCO}_3^-$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ ,  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$ ,  $\text{HPO}_4^{2-}$  y  $\text{PO}_4^{3-}$ . Los C1 hasta C6 representan las concentraciones formales, respectivamente, de  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ ,  $\text{KHCO}_3$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$  y  $\text{Cl}^-$ .

Considerando que el balance de masa para el ion potasio corresponde a la suma de las concentraciones formales de  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  y  $\text{KHCO}_3$ , que la concentración formal de  $\text{KHCO}_3$  es resultado de la pérdida de  $\text{PO}_4^{3-}$  del sistema precipitado como hidroxiapatita  $[\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2]$ , entonces combinando las ecuaciones (2) a (7) entre si y con el balance de masas de los carbonatos, las ecuaciones (8) a (11) entre si y con el balance de masas de los fosfatos, sustituyendo en (1) y expresando en términos de la actividad de ion hidrógeno ( $\text{H}^+$ ) resulta un polinomio de grado siete (7):

$$F1(\text{H}^+)^7 + F2(\text{H}^+)^6 + F3(\text{H}^+)^5 + F4(\text{H}^+)^4 + F5(\text{H}^+)^3 + F6(\text{H}^+)^2 + F7(\text{H}^+) + F8 = 0 \quad (12)$$

que presenta los siguientes coeficientes:

$$F1 = \frac{2K_s}{r_1 \cdot K_{1C} \cdot K_{2C} \cdot k \cdot P} \quad (13)$$

$$F2 = \frac{1}{r_5} + \frac{2 K_s \cdot K_{1P}}{r_1 \cdot r_{11} \cdot K_{1C} \cdot K_{2C} \cdot k \cdot P} \quad (14)$$

$$F3 = (C1 + C2 + 2C3 + C4) - (2C5 + C6) + \frac{K_{1P}}{r_5 \cdot r_{11}} + \frac{2 K_s \cdot K_{1P} \cdot K_{2P}}{r_1 \cdot r_{12} \cdot K_{1C} \cdot K_{2C} \cdot k \cdot P} \quad (15)$$

$$F4 = \frac{K_{1P} \cdot (C1+C2)}{r_{11}} + \frac{K_{1P} \cdot K_{2P}}{r_5 \cdot r_{12}} + \frac{2K_s \cdot K_{1P} \cdot K_{2P} \cdot K_{3P}}{r_1 \cdot r_{13} \cdot K_{1C} \cdot K_{2C} \cdot k \cdot P} - \frac{K_w}{r_6} - \frac{K_{1C} \cdot k \cdot P}{r_9} - \frac{K_{1P} \cdot C1}{r_{11}} \quad (16)$$

$$F5 = \frac{K_{1P} \cdot K_{2P} \cdot (C1+C2)}{r_{12}} + \frac{K_{1P} \cdot K_{2P} \cdot K_{3P}}{r_5 \cdot r_{13}} - \frac{K_w \cdot K_{1P}}{r_6 \cdot r_{11}} - \frac{K_{1C} \cdot k \cdot P \cdot K_{1P}}{r_9 \cdot r_{11}} - \frac{2K_{1C} \cdot K_{2C} \cdot k \cdot P}{r_{10}} - \frac{2K_{1P} \cdot K_{2P} \cdot C1}{r_{12}} \quad (17)$$

$$F6 = \frac{K_{1P} \cdot K_{2P} \cdot K_{3P} \cdot (C1+C2)}{r_{13}} - \frac{K_w \cdot K_{1P} \cdot K_{2P}}{r_6 \cdot r_{12}} - \frac{K_{1C} \cdot k \cdot P \cdot K_{1P} \cdot K_{2P}}{r_9 \cdot r_{12}} - \frac{2K_{1C} \cdot K_{2C} \cdot k \cdot P \cdot K_{1P}}{r_{10} \cdot r_{11}} - \frac{3K_{1P} \cdot K_{2P} \cdot K_{3P} \cdot C1}{r_{13}} \quad (18)$$

$$F7 = - \frac{K_w \cdot K_{1P} \cdot K_{2P} \cdot K_{3P}}{r_6 \cdot r_{13}} - \frac{K_{1C} \cdot k \cdot P \cdot K_{1P} \cdot K_{2P} \cdot K_{3P}}{r_9 \cdot r_{13}} - \frac{2K_{1C} \cdot K_{2C} \cdot k \cdot P \cdot K_{1P} \cdot K_{2P}}{r_{10} \cdot r_{12}} \quad (19)$$

$$F8 = - \frac{2K_{1C} \cdot K_{2C} \cdot k \cdot P \cdot K_{1P} \cdot K_{2P} \cdot K_{3P}}{r_{10} \cdot r_{13}} \quad (20)$$

La resolución de este sistema involucra encontrar la raíz del polinomio con significado químico en la actividad de ion hidrógeno ( $H^+$ ), lo cual puede hacerse mediante el método de Newton-Raphson. Es de hacer notar que la combinación de los valores (constantes de equilibrio, concentraciones formales y coeficientes de actividad) que constituyen cada uno de los coeficientes del polinomio da lugar a números reales. Es decir, un sistema natural tiene una naturaleza sustancialmente diferente a la que normalmente se considera en los problemas ideales de los cursos de programación o análisis numérico donde sus coeficientes son generalmente números enteros.

### Etapa II: Planificación de la distribución de la hoja de cálculo.

Aunque encontrar las raíces de un polinomio de grado 7 puede ser intimidante para los no iniciados en estos procedimientos, no es difícil cuando se instrumenta en una hoja de cálculo y se siguen estrategias de enseñanza-aprendizaje para reducir la aparente complejidad del sistema considerado. La más importante de ellas consiste en la organización de la hoja de cálculo en sectores que albergaran espacio para:

- 1) Las concentraciones formales del  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  y  $\text{KHCO}_3$ .
- 2) Los valores de prueba para el pH y la fuerza iónica.
- 3) Almacenar las constantes (valores A y B de la ecuación de Debye-Hückel) y las variables (carga y parámetros de tamaño) relacionadas con el cálculo de los coeficientes de actividad.
- 4) Almacenar las constantes de equilibrio que intervienen en el cálculo de los coeficientes del polinomio de grado 7 y en las concentraciones de las especies en solución.
- 5) Calcular los coeficientes del polinomio de grado 7 en la actividad de ion hidrógeno.
- 6) Instrumentar el método numérico para determinar la raíz del polinomio con significado químico para ( $\text{H}^+$ ).
- 7) Determinar las concentraciones de todas las especies en solución acuosa para calcular una nueva fuerza iónica y nuevos coeficientes de actividad.
- 8) Determinar la integridad operacional del modelo mediante la verificación de los balances de carga y masa.

Si los espacios que se designan para estas actividades se asumen como fijos, la hoja de cálculo puede ser utilizada como una plantilla para resolver otros sistemas diferentes. No obstante, es importante recalcar que los participantes deben tener un conocimiento previo de cómo opera el software gestor de la hoja de cálculo, es decir, saber la diferencia que existe entre una hoja de cálculo propiamente dicha y un libro (archivo que agrupa un conjunto de hojas de cálculo) y como se maneja, a un nivel muy básico, los sistemas de menú y las barras de herramientas.

Otro aspecto muy importante es saber introducir las fórmulas matemáticas en las celdas que se hayan destinado para ese fin. Este aspecto es crucial y generalmente no implica muchas dificultades si los participantes tienen una buena base algebraica. No obstante, es bueno señalar que las fórmulas se introducen en las celdas en una sola línea, posiblemente de una manera muy diferente a como se escriben en papel (donde generalmente ocupan varias líneas). Además, hay que incluir instrucciones sobre la sintaxis y la precedencia de los operadores (suma, resta, multiplicación, división, potenciación) y algunas funciones comunes (raíz cuadrada y logaritmos) que se utilizan para desarrollar las fórmulas. Por ejemplo, el operador para la multiplicación, que generalmente escribimos en el papel como un punto (.) o una equis (x), sólo es admitido como un asterisco (\*) en las hojas de cálculo.

A continuación, se hace una breve descripción de las 11 diferentes zonas de la hoja de cálculo, en el sentido aproximado de izquierda a derecha y de abajo hacia arriba, que se incluyen esquemáticamente en la Figura 1.

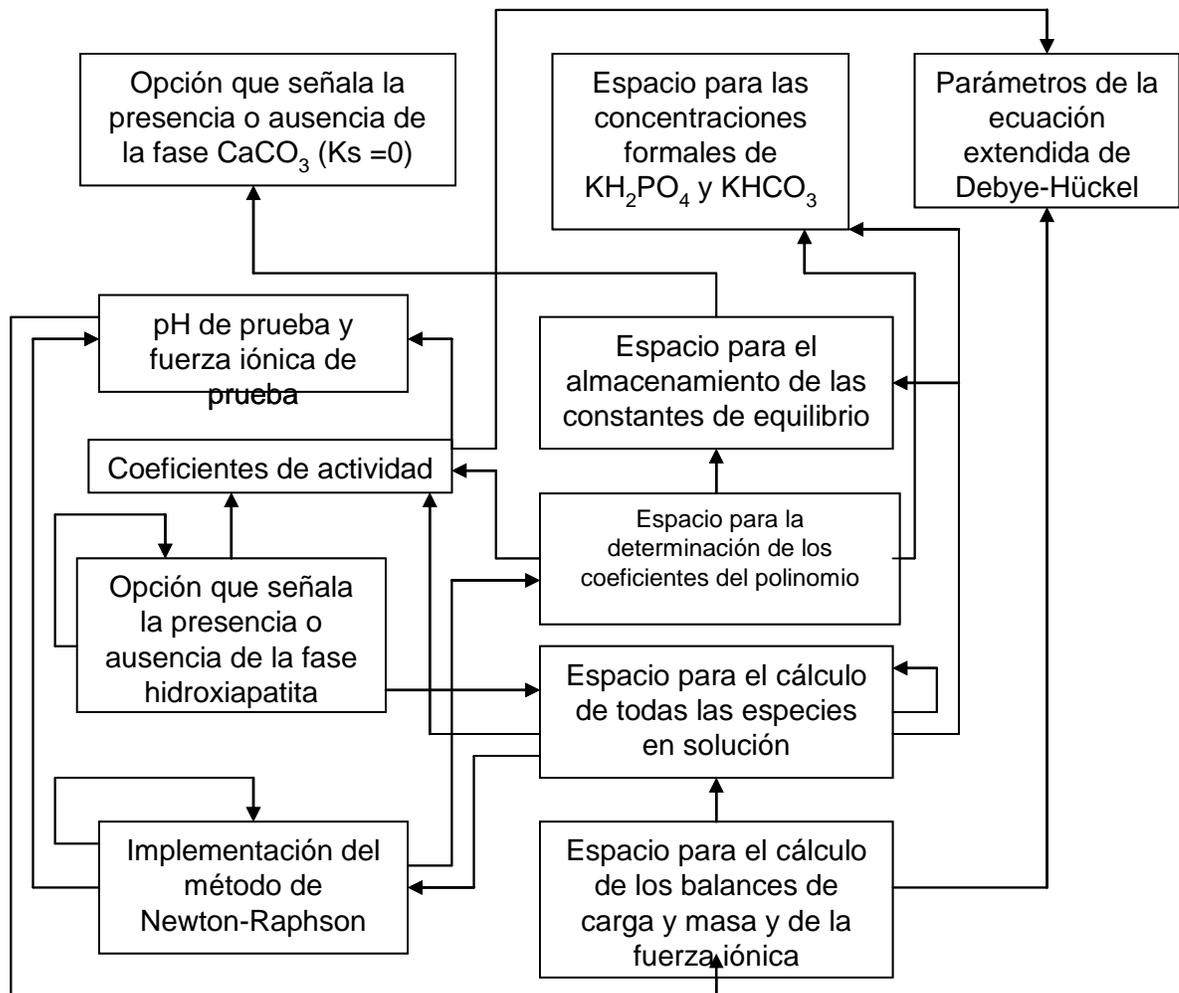


Figura 1. Diagrama esquemático que señala la distribución de la hoja de cálculo y las interrelaciones entre las diferentes zonas. La dirección de la flecha indica el rastro de los precedentes.

**1. Opción que señala la presencia o ausencia de la fase  $\text{CaCO}_3$ .** En la parte superior izquierda de la hoja de cálculo (Figura 1) se encuentran las opciones que indican si se encuentra presente o no la fase  $\text{CaCO}_3$ . La sintaxis es el “si” o “no” de nuestro idioma castellano. Si no se considera la fase sólida  $\text{CaCO}_3$ , esto equivale a tener una constante del producto de solubilidad para esta especie ( $K_s$ ) igual a cero (0) en la expresión (13). Por tanto, la ecuación (12) se convierte en un polinomio de grado seis porque  $F_1 = 0$ . También hay modificaciones parciales en los coeficientes  $F_2$ ,  $F_3$  y  $F_4$  (ecuaciones 14, 15 y 16). Para hacer  $K_s = 0$  o  $K_s = 5 \cdot 10^{-9}$ , existe una instrucción condicional en la zona donde se almacenan las constantes de equilibrio.

**2. Concentraciones formales de  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  y  $\text{KHCO}_3$ :** Las concentraciones de estas especies son complementarias. La del  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  ( $C_1$ ) se cambia manualmente en la hoja de cálculo y esto repercute

en el valor de la del  $\text{KHCO}_3$  ( $C_2$ ). La concentración total ( $C_T = C_1 + C_2$ ) es igual a la concentración de  $\text{K}^+$  y para determinar  $C_2$  se tiene simplemente que:  $C_2 = C_T - C_1$ . La variación manual se realiza hasta que la constante del producto de solubilidad (Kha) de la hidroxiapatita [ $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ ] no es excedido. El producto iónico para la hidroxiapatita es el siguiente:

$$\text{Kha} = [\text{Ca}^{2+}]^{10}[\text{PO}_4^{3-}]^6[\text{OH}^-]^2 \quad (21)$$

Se asume una concentración formal inicial de 0,01 M para el  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  porque es muy similar a la concentración total de sales típica en la solución de un suelo no salino. Cuando existe  $\text{CaCO}_3$ , la variación manual de C1 en la hoja de cálculo produce el valor de 0.000002327303 M ( $2,33 \cdot 10^{-6}$  M) como concentración formal máxima de  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  a la presión parcial del  $\text{CO}_2$  atmosférico, lo cual implicaría que no precipita más hidroxiapatita. En este caso, C2 en la hoja de cálculo corresponde prácticamente a 0,01 M (0.009997672697 M).

**3. Parámetros de la ecuación extendida de Debye-Hückel:** La ecuación extendida de Debye-Hückel (Peters *et al.*, 1974) viene dada por:

$$-\log r_i = \frac{A \sqrt{Z_i^2 \cdot I}}{1 + B \cdot a \cdot I} \quad (22)$$

donde  $r_i$  corresponde a los coeficientes de actividad de las especies químicas en solución acuosa, A y B son constantes que dependen de la temperatura y la constante dieléctrica del medio,  $Z_i$  es la carga de la especie química, I es la fuerza iónica del medio y a es un número ajustable empíricamente llamado "parámetro de tamaño iónico" y que puede interpretarse como el radio iónico hidratado. Las constantes A y B (a 25 °C) se obtuvieron del trabajo de Manov *et al.* (1943) y los parámetros de tamaño iónico hidratado (a) se tomaron de las tablas reportadas por Peters *et al.* (1974) [Cuadro 1]. La determinación de la fuerza iónica y los coeficientes de actividad se detalla más adelante.

Cuadro 1. Parámetros utilizados en la ecuación extendida de Debye-Hückel.

relativos a la temperatura (25 °C) y la constante dieléctrica del medio											
A = 0,509; B = 0,329											
parámetros de tamaño iónico (a)											
Ca <sup>2+</sup>	Mg <sup>2+</sup>	Na <sup>+</sup>	K <sup>+</sup>	OH <sup>-</sup>	Cl <sup>-</sup>	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	HCO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub>	HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	PO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>
6	8	4.5	3	9	3	3	4.5	4.5	4	4	4

**4. Valores de prueba para el pH y la fuerza iónica:** El KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> es una sal ácida y se espera, en consecuencia, un pH ácido en solución. Para estudiar este sistema con la hoja de cálculo no se considera la fase sólida CaCO<sub>3</sub>, lo cual equivale a tener K<sub>s</sub> = 0 en las expresiones (13), (14), (15) y (16). Si se considera una concentración formal para el KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> (C<sub>1</sub>) de 0,01 M y una presión parcial para el CO<sub>2</sub> de 3,5.10<sup>-4</sup> atm, la solución exacta para el sistema corresponde a pH 4,75. Cualquier valor menor o igual que 4,75 funciona bien como pH de prueba.

Cuando se considera la fase sólida CaCO<sub>3</sub> (K<sub>s</sub> = 5.10<sup>-9</sup>), existiría una fuente de calcio que induce la precipitación de los fosfatos como hidroxiapatita; este último un compuesto muy insoluble. Al desaparecer las diferentes especies fosfato precipitadas como hidroxiapatita, la compensación eléctrica del K<sup>+</sup> en solución sería conducida por el HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>, el CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> y el OH<sup>-</sup>, tornándose la solución fuertemente alcalina. Si se considera una concentración formal inicial para el KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> (C<sub>1</sub>) de 0,01 M y una presión parcial para el CO<sub>2</sub> de 3,5.10<sup>-4</sup> atm, la solución exacta para el sistema, después de manipular simultáneamente C<sub>1</sub> (tal como se indica en el numeral 2) y la fuerza iónica (como se detalla más adelante), el pH corresponde a 9,16. Cualquier valor menor o igual que 9,16 funciona bien como pH de prueba.

**5. Constantes de equilibrio:** Las constantes de equilibrio (disociación, ionización o precipitación) utilizadas fueron las siguientes:

- Para la ionización, disociación y solubilidad del CO<sub>2</sub> en agua (Nakayama, 1970): K<sub>1C</sub> = 4,34.10<sup>-7</sup>, K<sub>2C</sub> = 4,69.10<sup>-11</sup>, k = 0,0344 – 0,0084 I. Las presiones parciales de CO<sub>2</sub> (P) consideradas fueron 3,5.10<sup>-4</sup> atm (0,35.10<sup>-4</sup> MPa), 3,5.10<sup>-2</sup> atm (0,35.10<sup>-2</sup> MPa) y ≈ 0 atm.
- Para la autoprotólisis del agua (Nakayama, 1970): K<sub>w</sub> = 1.10<sup>-14</sup>
- Para la solubilidad del CaCO<sub>3</sub> en agua (Nakayama, 1970): K<sub>s</sub> = 5,0.10<sup>-9</sup>.
- Para la solubilidad de la hidroxiapatita en agua (Lindsay y Moreno, 1960): Kha = 2,00.10<sup>-114</sup>

- Para la disociación del  $H_3PO_4$  en agua (Butler, 1968):  $K_{1P} = 5,90 \cdot 10^{-3}$ ,  $K_{2P} = 6,15 \cdot 10^{-8}$ ,  $K_{3P} = 4,80 \cdot 10^{-13}$ .

**6. Cálculo de los coeficientes de actividad y la fuerza iónica (I):** Para determinar los coeficientes de actividad ( $r_i$ ) en la hoja de cálculo, para cada una de las especies químicas involucradas, estos deben ser despejados a partir de la expresión (22) como:

$$r_i = 10^{\left[ \frac{A \cdot Z_i^2}{1 + B \cdot a \cdot I} \right]} \quad (23)$$

donde el símbolo (^) indica “elevado al exponente” que está encerrado entre corchetes [ ]. Para calcular los coeficientes de actividad se requiere un conocimiento explícito de I y este es un parámetro inicial desconocido. Por tanto, se debe emplear un valor inicial de prueba. Se obtuvieron siempre resultados satisfactorios cuando se asumió para la I de prueba el valor correspondiente a la concentración formal inicial del  $KH_2PO_4$ . Después del primer cálculo de los coeficientes de actividad, estos se utilizan conjuntamente con los valores correspondientes de las constantes de equilibrio y las concentraciones formales de las especies que así lo ameriten, para estimar las concentraciones de todas las especies químicas en solución (ecuaciones 25 a 33). En la ecuación (1), las concentraciones de  $Na^+$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Cl^-$  y  $SO_4^{2-}$  son cero si se considera una solución acuosa de  $KH_2PO_4-CaCO_3$ . Una vez calculadas todas las concentraciones con las ecuaciones (25) a (33), las especies iónicas se utilizan para obtener una nueva I mediante la expresión:

$$I = \frac{1}{2} \sum C_i \cdot Z_i^2 \quad (24)$$

donde  $C_i$  y  $Z_i$  se refieren, respectivamente, a las concentraciones y a la carga de cada uno de los iones que se encuentran en la ecuación (1). El valor de I calculado con la ecuación (24) se transfiere manualmente a la celda que contiene el valor de prueba para I, lo que permite mejorar la estimación de los coeficientes de actividad. El proceso se repite hasta que la diferencia entre dos valores sucesivos para I sea menor que un valor determinado de tolerancia (es decir, converjan). Esta parte de la hoja de cálculo permitiría introducir los conceptos de cálculos iterativos y de convergencia, sin necesidad de estar programando en un sentido estricto.

**7. Espacio para la determinación de los coeficientes del polinomio:** Los coeficientes (8 en total) del polinomio de grado 6 ( $K_s = 0$ ) o 7 ( $K_s = 5 \cdot 10^{-9}$ ) se determinan en una zona específica de la hoja de cálculo (Figura 1) empleando las expresiones (13) hasta la (20). Estos coeficientes varían cuando mejora la estimación de los coeficientes de actividad a medida que varía el valor de I. Para cada celda donde se ubican estos coeficientes, se hace referencia a los respectivos coeficientes de actividad, concentraciones formales y constantes de equilibrio. La determinación de estos coeficientes, conjuntamente con los de actividad, es la parte crítica del proceso. Debido a la gran extensión que tienen algunas de las expresiones desde la (13) hasta la (20), es muy factible cometer errores cuando se introducen las fórmulas en las celdas correspondientes; aún teniendo gran experiencia en el manejo de hojas de cálculo. Por esta razón, es necesario tener un control de

calidad de los resultados que viene dado por la verificación simultánea del balance de carga y de los balances de masa. La suma de cationes debe ser igual a la suma de aniones, la suma de todas las especies fosfato ( $\text{H}_3\text{PO}_4$ ,  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$ ,  $\text{HPO}_4^{2-}$ ,  $\text{PO}_4^{3-}$ ) debe ser igual a la concentración formal de la sal  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  y la suma de todas las especies carbonato ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{CO}_3$ ,  $\text{HCO}_3^-$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ ) debe ser igual a la concentración formal de la sal  $\text{KHCO}_3$ . Si esto no se logra es porque existen errores en la introducción de las fórmulas correspondientes a las expresiones (13) hasta la (20), en los balances de masa o en el cálculo de los coeficientes de actividad. Si se quiere facilitar la búsqueda de errores para los dos primeros, se puede asumir inicialmente idealidad en el sistema, es decir, coeficientes de actividad igual a 1 y proceder a hacer los cálculos correspondientes. Es importante recalcar que al hacer esta asunción las expresiones (13) hasta la (20) deben llamar explícitamente a estos coeficientes iguales a 1. Cuando los balances de carga y masa den los resultados esperados, se asume el cálculo correspondiente de los coeficientes de actividad con la fórmula de Debye-Hückel. Cualquier error posterior en los balances de carga y masa será entonces atribuible al cálculo de los coeficientes de actividad y es allí donde deberán buscarse futuros errores.

**8. Opción que señala la presencia o ausencia de la fase hidroxiapatita:** El producto iónico de la hidroxiapatita (ecuación 21) es determinado en una celda con las respectivas concentraciones y coeficientes de actividad para los iones  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{PO}_4^{3-}$  y  $\text{OH}^-$ . Es comparado con el valor experimental de Kha (Lindsay y Moreno, 1960) en otra celda. Si el producto iónico excede el Kha, la solución estaría sobresaturada y precipita la hidroxiapatita. Por tanto, la concentración de  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  ( $C_1$ ) se cambia manualmente (disminuyéndola) en la hoja de cálculo hasta que el producto iónico sea igual a  $2,00 \cdot 10^{-114}$ . Este proceso se realiza antes de cualquier iteración para I. Si el ajuste posterior de I aumenta el producto iónico de la hidroxiapatita se procede nuevamente a disminuir la concentración  $C_1$ . No obstante, estas variaciones son pequeñas y la convergencia se alcanza rápidamente.

**9. Espacio para el cálculo de todas las especies en solución:** Las especies en solución acuosa se determinan mediante las expresiones (25) a (33) y se calculan en celdas individuales en una región específica de la hoja de cálculo (Figura 1). Estas concentraciones varían a medida que mejora la estimación de los coeficientes de actividad en las iteraciones manuales de la fuerza iónica. Las fórmulas son las siguientes:

$$[\text{H}^+] = \frac{(\text{H}^+)}{r_5} \quad (25)$$

$$[\text{OH}^-] = \frac{K_w}{r_5 \cdot r_6 \cdot [\text{H}^+]} \quad (26)$$

$$(0.0344 - 0.0084 \cdot I) \cdot P \cdot K_{1C}$$

$$[\text{HCO}_3^-] = \frac{\quad}{r_5 \cdot r_9 \cdot [\text{H}^+]} \quad (27)$$

$$[\text{CO}_3^{2-}] = \frac{[\text{HCO}_3^-] \cdot r_9 \cdot K_{2C}}{r_5 \cdot r_{10} \cdot [\text{H}^+]} \quad (28)$$

$$[\text{Ca}^{2+}] = \frac{K_S}{r_1 \cdot r_{10} \cdot [\text{CO}_3^{2-}]} \quad (29)$$

$$[\text{H}_2\text{PO}_4^-] = \frac{[\text{H}_3\text{PO}_4] \cdot K_{1P}}{r_5 \cdot r_{11} \cdot [\text{H}^+]} \quad (30)$$

$$[\text{HPO}_4^{2-}] = \frac{r_{11} \cdot [\text{H}_2\text{PO}_4^-] \cdot K_{2P}}{r_5 \cdot r_{12} \cdot [\text{H}^+]} \quad (31)$$

$$[\text{PO}_4^{3-}] = \frac{r_{12} \cdot [\text{HPO}_4^{2-}] \cdot K_{3P}}{r_5 \cdot r_{13} \cdot [\text{H}^+]} \quad (32)$$

$$[\text{K}^+] = C1 + C2 \quad (33)$$

Si se programara la rutina de cálculo de concentraciones en algún lenguaje de programación, el cálculo con varias de estas expresiones sería necesariamente secuencial y está reflejado en la serie de expresiones 25 a 33 (que es una de las posibles). Sin embargo, en el caso de la hoja de cálculo el orden es irrelevante porque en ella sólo se rastrean los precedentes involucrados en las determinaciones. No obstante, se hace énfasis en el orden porque sería básico en la programación estructurada si en el futuro se quiere adaptar esta aplicación para algún lenguaje de programación.

**10. Método numérico para determinar las raíces del polinomio:** Para encontrar las raíces de un polinomio empleando métodos numéricos se seleccionó el de Newton-Raphson (Chapra y Canale, 2002), el cual parece ser adecuado para resolver este tipo de sistemas porque no presenta problemas de convergencia (Guerrero *et al.*, 2002). Para el proceso iterativo se tiene que:

$$(\text{H}^+)_{i+1} = (\text{H}^+)_i + (F[(\text{H}^+)_i] / [(\text{H}^+)_i]) \quad (34)$$

donde  $F[(H^+)_i]$  es la evaluación del polinomio representado por la ecuación (12) en  $(H^+)_i$   $[(H^+)_i]$  es la función primera derivada del referido polinomio:

$$[(H^+)] = 7F1(H^+)^6 + 6F2(H^+)^5 + 5F3(H^+)^4 + 4F4(H^+)^3 + 3F5(H^+)^2 + 2F6(H^+) + F7 \quad (35)$$

evaluada en  $(H^+)_i$ . El valor de prueba se toma indirectamente de una celda que contiene la fórmula para transformar valores de pH en  $(H^+)$   $[(H^+) = 10^{-pH}]$ . Cuando el valor absoluto entre dos valores consecutivos de pH es menor que  $1 \cdot 10^{-20}$  una instrucción condicional despliega el valor de convergencia en la celda correspondiente. A partir de allí, todos los valores de pH son idénticos. La posición donde se presenta el valor del pH de convergencia depende del valor del pH de prueba. Esta convergencia ocurre más rápido mientras más cerca esté el valor de prueba del pH de convergencia. Para desplegar la convergencia se dispusieron arbitrariamente 100 celdas para que el valor de la  $(H^+)$ , en el sector habilitado para el cálculo de concentraciones, fuese tomado aproximadamente de la mitad de ese intervalo de celdas. Cuando el pH de prueba excede el valor del pH teórico, se produce un error que se visualiza fácilmente porque aparece en las casillas respectivas la expresión ¡NUM! que señala el intento de calcular el logaritmo de un número negativo. En la región correspondiente, también se observan inconsistencias tales como concentraciones e I negativas.

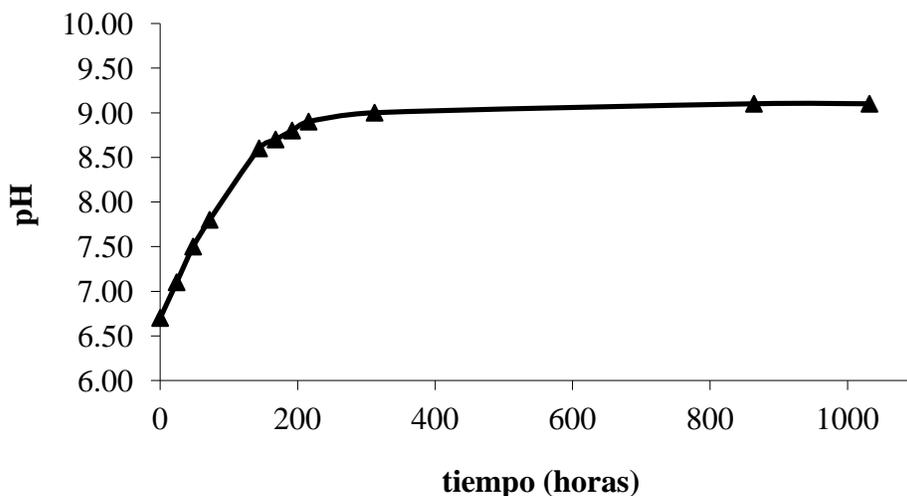
Para probar si esta área de la hoja de cálculo funciona adecuadamente, se puede utilizar un caso ideal. Por ejemplo, el polinomio  $F(X) = X^7 + 2X^6 - 6X^5 - 12X^4 + 9X^3 + 18X^2 -$   
 $(X) = 7X^6 + 12X^5 - 30X^4 - 48X^3 + 27X^2 + 36X - 4$ , presenta raíces en X igual a 1 (degeneración 2), 2 (degeneración 2), -1 (degeneración 2) y -2, es decir, factorizado en términos de sus monomios constituyentes tendríamos  $F(X) = (X - 1)^2 \cdot (X - 2)^2 \cdot (X + 1)^2 \cdot (X + 2)$ . En este caso, si se utiliza 0,1 como valor de prueba en la hoja de cálculo, el procedimiento converge a -2, una de las posibles raíces. Es recomendable que el primer procedimiento que se instrumente en la hoja de cálculo sea el de Newton-Raphson y luego se incluyan las demás áreas para el sistema químico a considerar. Es muy importante no olvidar que los valores de prueba para el sistema químico corresponden al “menos logaritmo de  $(H^+)$ ” porque esto puede traer confusión a la hora de interpretar los resultados con los sistemas ideales recomendados para instrumentar y validar el procedimiento. Por ejemplo, para la raíz -2 del caso anterior no se puede calcular su logaritmo negativo y se podría creer erróneamente que el procedimiento no ha sido adecuadamente instrumentado en la hoja de cálculo.

**11. Espacio para el cálculo de los balances de carga y masa y de la fuerza iónica:** Los balances de carga y masa son los que permiten verificar la integridad operacional del modelo. En una solución acuosa se cumple el principio de electroneutralidad y por tanto, la suma de cationes debe ser igual a la suma de aniones. Por otra parte, la suma de todas las especies fosfato ( $H_3PO_4$ ,  $H_2PO_4^-$ ,  $HPO_4^{2-}$ ,  $PO_4^{3-}$ ) debe ser igual a la concentración formal de  $KH_2PO_4$  y la suma de todas las especies carbonato ( $CO_2$ ,  $H_2CO_3$ ,  $HCO_3^-$ ,  $CO_3^{2-}$ ) debe ser igual a la concentración formal de  $KHCO_3$ . Cuando estos balances no se cumplen, se cometieron errores al introducir una o varias de las expresiones que corresponden al cálculo de los coeficientes de actividad, los coeficientes del polinomio de grado 7 o en las expresiones para determinar las concentraciones de las especies en solución, entre otras.

**Etapas III: Validación experimental de los resultados teóricos obtenidos con la hoja de cálculo.**

Un modelo teórico, por más elaborada que sea su formulación matemática, no tendría ningún valor si no es capaz de predecir los hechos experimentales. Para corroborar experimentalmente la validez del modelo, el pH de una solución 0,01 M de  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  fue medido antes y después de añadir el  $\text{CaCO}_3$ . Se usó agua destilada, equilibrada con el  $\text{CO}_2$  atmosférico, para preparar la solución de  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  y a la cual se le midió el pH inmediatamente. Después de añadir el  $\text{CaCO}_3$ , el sistema se dejó reposar en una cámara húmeda para reducir las pérdidas por evaporación y favorecer el intercambio de  $\text{CO}_2$  con la atmósfera. Las variaciones de pH se registraron por espacio de 44 días (Figura 2).

Los resultados señalan que el pH experimental (4,7) para la solución 0,01 M de  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  (sal ácida) es similar al valor teórico (4,75) que pronostica el modelo. Con  $\text{CaCO}_3$  y  $P$  atmosférica, el pH inicial de la solución de  $\text{KH}_2\text{PO}_4\text{-CaCO}_3$  (6,7 medido inmediatamente) varió, durante 37 días, hasta 9,1; cercano al valor pronosticado por el modelo (9,16). Sin embargo, ya el 93 % de la variación de pH esperada ocurrió sólo en los primeros 14 días de la experiencia (Figura 2). En el sistema  $\text{KH}_2\text{PO}_4\text{-CaCO}_3$ , el pH inicial ligeramente ácido señala que la cantidad de  $\text{CO}_2$  en el seno de la solución es superior al que sería compatible con la solubilidad en agua de este gas en equilibrio con la atmósfera. Sin embargo, la variación de pH con el tiempo indica que el  $\text{CO}_2$  en exceso en la solución difunde lentamente a la atmósfera, por espacio de varios días, hasta que se obtienen los valores de pH fuertemente alcalinos que pronostica el modelo. Esta fuerte alcalinidad se produciría debido a que gran parte del fósforo (Cuadro 2) precipitaría bajo la forma de hidroxiapatita y para restituir el equilibrio de cargas el sistema responde produciendo mas  $\text{HCO}_3^-$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$  (disolviendo  $\text{CaCO}_3$ ) y  $\text{OH}^-$ ; compatible con la formación de  $\text{KHCO}_3$  y  $\text{K}_2\text{CO}_3$  (sales con hidrólisis alcalina). Estos resultados señalan la importancia que tiene el  $\text{CO}_2$  en el control de las especies en solución en los sistemas con carbonatos debido a su lenta difusión a la atmósfera.



Cuadro 2. Concentración de especies iónicas pronosticadas por el modelo a diferentes presiones parciales ( $P$ ) de  $\text{CO}_2$ .

Sistema	$\text{Ca}^{2+}$	$\text{H}^+$	$\text{OH}^-$	$\text{HCO}_3^-$	$\text{CO}_3^{2-}$	$\text{H}_2\text{PO}_4^-$	$\text{HPO}_4^{2-}$	$\text{PO}_4^{3-}$
$\text{KH}_2\text{PO}_4$ §	0,00	$1,96 \cdot 10^{-5}$	$6,21 \cdot 10^{-10}$	$3,22 \cdot 10^{-7}$	$1,15 \cdot 10^{-12}$	$9,93 \cdot 10^{-3}$	$4,65 \cdot 10^{-5}$	$2,09 \cdot 10^{-12}$
$\text{KH}_2\text{PO}_4\text{-CaCO}_3$ §	$1,45 \cdot 10^{-5}$	$7,54 \cdot 10^{-10}$	$1,63 \cdot 10^{-5}$	$8,43 \cdot 10^{-3}$	$7,90 \cdot 10^{-4}$	$1,87 \cdot 10^{-8}$	$2,31 \cdot 10^{-6}$	$2,76 \cdot 10^{-9}$
$\text{KH}_2\text{PO}_4\text{-CaCO}_3$ ¶	$7,97 \cdot 10^{-4}$	$5,56 \cdot 10^{-8}$	$2,23 \cdot 10^{-7}$	$1,16 \cdot 10^{-2}$	$1,51 \cdot 10^{-5}$	$5,52 \cdot 10^{-7}$	$9,48 \cdot 10^{-7}$	$1,60 \cdot 10^{-11}$
$\text{KH}_2\text{PO}_4\text{-CaCO}_3$ ¥	$3,76 \cdot 10^{-6}$	$3,80 \cdot 10^{-12}$	$3,28 \cdot 10^{-3}$	$1,70 \cdot 10^{-4}$	$3,28 \cdot 10^{-3}$	$8,11 \cdot 10^{-13}$	$2,06 \cdot 10^{-8}$	$5,18 \cdot 10^{-9}$

§  $P = 0,35 \cdot 10^{-4}$  MPa, pH = 4,75 y 9,16; respectivamente

¶  $P = 0,35 \cdot 10^{-2}$  MPa, pH = 7,30

¥  $P \approx 0$  MPa, pH = 11,46

En suelos cultivados, bajo pastizales o bajo bosque las concentraciones de  $\text{CO}_2$  en la atmósfera del suelo comúnmente exceden entre un 30 y un 70 % las cantidades del  $\text{CO}_2$  atmosférico (Dahlgren et al., 1997). Este hecho, conjuntamente con la lenta difusión del  $\text{CO}_2$  disuelto a la atmósfera y la capacidad tampón del suelo, podrían sugerir que es posible mantener un adecuado nivel de fósforo disponible en solución para suelos calcáreos si se utilizara  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  como fuente de fósforo soluble. Afortunadamente, este compuesto aparentemente no se utiliza en la preparación de fertilizantes como fuente primaria de fósforo o potasio (quizás por su costo elevado) porque podría alcalinizar fuertemente suelos calcáreos; especialmente en la superficie de suelos tropicales donde las elevadas temperaturas favorecerían los intercambios de gases en la interfase suelo-atmósfera. Sin embargo, Bermejo (1980) señala que en los Estados Unidos se fabrica  $\text{K}_2\text{CO}_3$ , a partir de  $\text{KCl}$ , para la manufactura de fertilizantes para tabaco y que el  $\text{KHCO}_3$ , cuando se aplica con fertilizantes fosfóricos, aumenta la disponibilidad del potasio en el suelo. Si estos materiales se utilizaran en suelos calcáreos, según los resultados pronosticados por el modelo, se podrían correr los riesgos ya predichos; especialmente si no se incorporan al suelo.

Aunque el modelo aquí expuesto es todavía muy sencillo, es factible de ser desarrollado para incorporar un intercambiador de iones que permita simular la capacidad de intercambio catiónico y aniónico (especialmente fósforo) del suelo. Por otra parte, también es factible de ser incorporada la presencia de otras especies como el fosfato monoamónico o diamónico, que son de amplio uso como fertilizantes fosfatados en el país.

### Agradecimientos

Los autores desean expresar su agradecimiento al Doctor Rafael Guillermo Camacho por la lectura crítica del manuscrito y al Fondo Nacional de Ciencia y Tecnología (FONACIT, Proyecto PEM 2001001622) y a la Universidad "Rómulo Gallegos" por el apoyo logístico y financiero.

### Referencias

- Bates, A. W. (1993). Educational aspects of the telecommunications revolution. En Davis, G. y Samways, B. (Ed.) *Teleteaching*. Amsterdam. Norte Holanda.
- Brown, J. S.; Collins, A. ; Duguid, S. (1989). Situated cognition and the culture of learning. En *Educational Researcher*, 18, 1.
- Bruce, B.; Peyton, J. K.; Bastón, T. (1993). *Network-based classrooms: Promises and realities*. Cambridge University Press.
- Burge y Collins. (1995). Citado por: Stojanovic, L. (2001). Integración de las tecnologías de información al proceso instruccional en la educación: Rol del docente. En *Docencia Universitaria*. Vol II. N°2. SADPRO-UCV.
- Butler, J.N. (1968). *Cálculos de pH y de solubilidad. Las matemáticas de los equilibrios iónicos más sencillos*. Bogotá: Fondo Educativo Interamericano.
- Chacón, F. (1992). Medios de computación en la educación a distancia. En Silvio, J (Ed.) *Calidad, Tecnología y Globalización en la Educación Superior*. Latinoamericana. Caracas. UNESCO\_CRESALC.
- Chapra, S.C. y Canale, R.P. (2001). *Métodos Numéricos para Ingenieros*. México: Mc Graw-Hill.
- Coleman, F. (1998). Interactive Spreadsheet Demonstrations for Introductory, Inorganic, Analytical and Physical Chemistry. <http://www.wellesley.edu/Chemistry/chem120/sheets.html>
- Dahlgren, R.A., H.J. Percival y R.L. Parfitt. (1997). Carbon dioxide degassing effects on soil solutions collected by centrifugation. *Soil Science* 162(9): 648-655.
- Fernández, A.; Prieto, M.M. (2003). Estudio y diseño de una planta de ácido nítrico mediante simulación. En G. Pinto (Editor), *Didáctica de la Química y Vida Cotidiana*, (432 pp.), Madrid: Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid.
- Gómez, A., Montes de Juan, F., de Vicente Pérez, S. (2003). Los diagramas de relaciones molares en el estudio de los equilibrios químicos. En G. Pinto (Editor), *Didáctica de la Química y Vida Cotidiana*, (432 pp.), Madrid: Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid.

- González, P., González, E. (2003) ¡En casa y con gaseosa! En G. Pinto (Editor), *Didáctica de la Química y Vida Cotidiana*, (432 pp.), Madrid: Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid.
- Grafton, P., Todd, J. (2003). *Calculus for the Life Science*. Boston: Addison-Wesley ([http://www.aw-bc.com/greenwell/cls01\\_excel.pdf](http://www.aw-bc.com/greenwell/cls01_excel.pdf)).
- Guerrero-Alves, J., Pla-Sentís, I. & Camacho, R. (2002). A model to explain high values of pH in an alkali sodic soil. *Scientia Agricola*, 59(4), 763-770.
- Harasin (1993). Citado por: Stojanovic, L. (2001). Integración de las tecnologías de información al proceso instruccional en la educación: Rol del docente. En *Docencia Universitaria*. Vol II. N°2. SADPRO-UCV.
- Ledanois, J.M., López de Ramos, A., Pimentel, J.A. & Pironti, F. (2000). *Métodos Numéricos Aplicados en Ingeniería*. Santafé de Bogotá: Mc Graw-Hill Interamericana.
- Lindsay, W.L. & Moreno, E.C. 1960. Phosphate phase equilibria in soils. *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, 27: 177-182.
- Manov, G.G., Bates, R.G., Hamer, W.J. & Acree, S.F. (1943). Values of the Constants in the Debye-Hückel Equation for Activity Coefficients. *J. Am. Chem. Soc.*, 65, 1765-1767.
- Martínez, J. (2003). Cinética química: análisis de una experiencia práctica en el aula. En G. Pinto (Editor), *Didáctica de la Química y Vida Cotidiana*, (432 pp.), Madrid: Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid.
- Nakayama, F.S. (1970). Hydrolysis de  $\text{CaCO}_3$ ,  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  y  $\text{NaHCO}_3$  and their combinations in the presence and absence of external  $\text{CO}_2$  source. *Soil Sci.*, 109: 391-398.
- Narros, A., Martínez, J, Pozas, F. (2003). El proceso Solvay: una práctica para enlazar la química industrial y la química cotidiana. En G. Pinto (Editor), *Didáctica de la Química y Vida Cotidiana*, (432 pp.), Madrid: Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid.
- Orozco, C., Pérez, A., González, M.N. (2003). Interés por la química a través del medio ambiente. En G. Pinto (Editor), *Didáctica de la Química y Vida Cotidiana*, (432 pp.), Madrid: Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid.
- Perrault, J. (1993). New requirements for educational systems in industrialized countries due to changing training needs: En Davis, G. y Samways, B. (Eds.) *Teleteaching*. Amsterdam. Norte Holanda.
- Peters, D.G., Hayes, J.M. & Hieftje, G.M. (1974). *Chemical Separations and Measurements. Theory and Practice of Analytical Chemistry*. Philadelphia: W. B. Saunders Company.

Pinto, G., Rohrig, B. (2003). Química de los cloroisocianuratos y desinfección del agua. En G. Pinto (Editor), *Didáctica de la Química y Vida Cotidiana*, (432 pp.), Madrid: Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid.

Pinto, G. (2004). *Didáctica de la Química y Vida Cotidiana*. <http://quim.iqi.etsii.upm.es/vidacotidiana/jornada.htm>

Ponnamperuma, F.N. (1967). A Theoretical Study of Aqueous Carbonate Equilibria. *Soil Sci.*, 103: 90-100.

Prieto, M.M; Fernández, A. (2003). Distest: estudio conceptual de algunas de las propiedades de la distribución normal mediante microordenador. En G. Pinto (Editor), *Didáctica de la Química y Vida Cotidiana*, (432 pp.), Madrid: Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid.

Stojanovic, L. (2001). Integración de las tecnologías de información al proceso instruccional en la educación: Rol del docente. En *Docencia Universitaria*. Vol II. N°2. SADPRO-UCV.

#### **LOS AUTORES**

##### **José Guerrero Alves\***

Lic. en Química, UCV y MSc. en Química Ambiental, IVIC  
Dr. en Ciencia del Suelo, UCV  
Investigador en suelos y aguas afectados por sales  
Aplicaciones de la informática en problemas químicos, ambientales y educativos  
e-mail: joseguer@cantv.net

##### **Olga Marval de Barrios\*\***

Lic. en Biología, UDO  
MSc. Docencia Educación Superior y Dra. en Ciencias de la Educación  
Miembro de la Comisión Nacional de Currículum, Profesora Titular, Jubilada.  
Investigadora en Neurociencia y Educación, Currículum.  
e-mail: olgamarval@yahoo.com

##### **Ayuramy Martínez\***

Ing. Químico, UC  
Candidato a MSc en Ciencia del Suelo, UCV  
Especialista en análisis de suelos y aguas

\*Centro de Investigación en Suelos y Aguas CIESA-UNERG  
San Juan de los Morros, Estado Guárico-Venezuela

\*\* Área de Postgrado en Educación, UNERG.  
Avenida Miranda Edificio CAPUNERG, Oficina 1, San Juan de los Morros, Guárico.

### **Datos de la Edición Original Impresa**

Guerrero Alves, J. Marval de Barrios, O. y Martinez, A. (2004, Diciembre). Uso de una hoja de cálculo como una estrategia didáctica en la enseñanza de la química de los equilibrios iónicos en solución. *Paradigma*, Vol. XXV. N° 2, Diciembre de 2004 / 227-264

\