

Parte III

Simulaciones y Analogías

VELOCIDAD DE LA REACCIÓN QUÍMICA: MODELOS Y ANALOGÍAS

Joaquín Martínez Urreaga

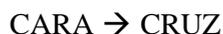
Departamento de Ingeniería Química Industrial y del Medio Ambiente
E.T.S. de Ingenieros Industriales, Universidad Politécnica de Madrid
José Gutiérrez Abascal 2, 28006-Madrid. jmartinez@iqi.etsii.upm.es

En este trabajo se analizan los resultados obtenidos en la simulación de una reacción química realizada con monedas en el aula. Se pretende discutir la validez de las experiencias con monedas como analogías de los procesos químicos y la utilidad de las ecuaciones que empleamos para describir la evolución de las concentraciones durante las reacciones químicas. El análisis de los resultados indica que las experiencias con monedas son analogías adecuadas para los procesos químicos. Las ecuaciones mencionadas son sólo modelos simplificados, que suponen una descripción adecuada del proceso en la mayoría de los casos, pero que resultan insuficientes cuando en la reacción interviene un número pequeño de moléculas.

1. INTRODUCCIÓN

¿Qué relación existe entre una reacción química en la que unas moléculas desaparecen y una experiencia con monedas en la que las monedas cambian de cara a cruz?. A primera vista puede parecer que ninguna, pero si analizamos la cuestión veremos que existe una relación bastante estrecha. Se trata de una analogía bien fundamentada, que permite simular reacciones químicas mediante sencillas experiencias con monedas, y que puede tener por tanto un elevado valor como herramienta de enseñanza-aprendizaje.

En otra comunicación presentada a esta misma Jornada (1), se ha discutido en detalle una experiencia práctica que los alumnos pueden realizar en el aula con monedas. Se trata del proceso:



en el que los alumnos lanzan las monedas y cuentan el número de caras que queda en cada tirada, tras retirar las cruces que han aparecido. De esta manera simulan la reacción química no reversible:



que describe muchos procesos reales, como descomposiciones térmicas y desintegraciones radiactivas, de gran interés.

Esta experiencia permite trabajar sobre muchos de los conceptos clave de la cinética química, como son orden, constante de velocidad, determinación de la ecuación de velocidad, ecuación integrada de velocidad, energía de activación o mecanismo de reacción. En cuanto al valor como herramienta educativa, estas

simulaciones con monedas resultan herramientas eficaces al mismo tiempo que atractivas para los alumnos, por su carácter dinámico, porque fomentan la participación activa y porque permiten integrar teoría, problemas y práctica de laboratorio.

En esta comunicación se pretende analizar la validez de las experiencias con monedas como analogías de los procesos químicos. Más específicamente, se pretende discutir el uso de estas experiencias para trabajar con los alumnos cuestiones como la naturaleza de la reacción química y la utilidad de los modelos que empleamos para describir la evolución de las concentraciones de reactivos y productos durante las reacciones químicas. Para ello, se analizan los resultados experimentales obtenidos en la experiencia citada (CARA \rightarrow CRUZ) y se discuten los modelos empleados para describir esos resultados.

2. ANÁLISIS DE RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La figura 1 muestra dos series de valores (número de caras, N_C , en función del número de tirada, t) obtenidos en dos replicaciones del experimento citado. Como se ha mostrado en la comunicación antes citada (1), estos datos indican que se trata de un proceso de orden 1, esto es, los datos experimentales $N_C - t$ se ajustan a (pueden describirse mediante) las siguientes ecuaciones:

$$N_C = N_{C,0} \cdot e^{-kt} \quad (1)$$

$$\ln(N_C) = \ln(N_{C,0}) - kt \quad (2)$$

donde:

$N_{C,0}$ = número inicial de caras, y

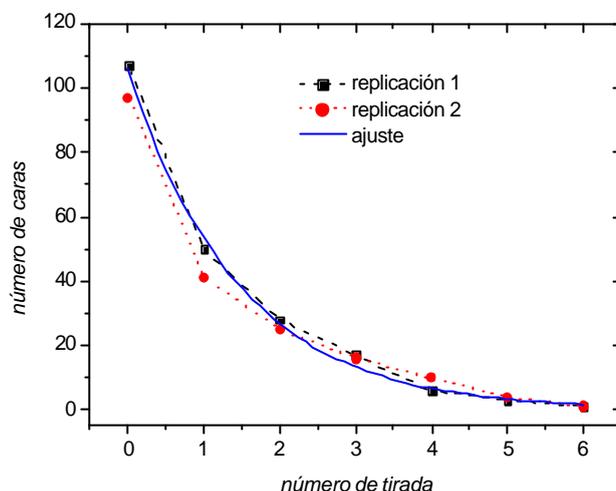
k = constante específica de velocidad (= 0,693 en este caso).

En la figura 1 se incluye también, en línea continua, la curva exponencial (según la ecuación 1) que mejor se ajusta a los resultados experimentales de la primera replicación.

Además de la información sobre el orden cinético, la figura 1 muestra al menos otros dos resultados interesantes: la diferencia entre las dos replicaciones y las diferencias entre los resultados medidos experimentalmente y la curva del ajuste exponencial. Muchos alumnos creen que estas diferencias carecen de importancia, que es la curva exponencial la que describe la realidad de los hechos y que las desviaciones experimentales son errores sin significado alguno.

Pero en este caso no es así. Se puede preguntar a los alumnos por las causas de los errores experimentales, porque si las monedas son iguales, la agitación no influye (siempre que sea suficiente) en la probabilidad de que salga cara o cruz, y no nos hemos equivocado contando las monedas, ¿qué otras fuentes de error existen?. Y, si

no hay fuentes de error, ¿a qué se deben las desviaciones experimentales y las diferencias entre replicaciones?



Figural. Curvas $N_C - t$ obtenidas en dos replicaciones de la misma experiencia (líneas discontinuas). La línea continua es el ajuste Exponencial de los datos de la replicación 1.

De las respuestas de los alumnos parece como si pensarán que la naturaleza se equivoca, que es “ruidosa” y “poco exacta”. Podríamos pensar que en la percepción de los alumnos se ha sustituido, a todos los efectos y de forma automática, la realidad (los valores experimentales) por el modelo (la curva del ajuste exponencial). Parece que una mayoría de los alumnos no es consciente de que el modelo es sólo una versión resumida, simplificada, que empleamos para describir más fácil y rápidamente una realidad más compleja, con más matices.

Esa suplantación automática de la realidad por el modelo simplificado, que sin duda fomentamos con nuestros métodos de enseñanza de la química (aunque seguramente sucede también en otras asignaturas), plantea serias dudas sobre la capacidad de comprensión de la naturaleza por parte de nuestros alumnos. Aunque todos estamos de acuerdo en la utilidad del empleo de modelos simplificados, quizás debiéramos plantearnos qué modelos y aproximaciones emplear en la enseñanza de la química, y sobre todo cómo hacer comprender a nuestros alumnos que se trata de modelos, no de la realidad, y por qué los empleamos.

Otra manera de explicar a los alumnos el significado de las variaciones observadas en los resultados experimentales es analizar detenidamente los números medidos y la naturaleza del experimento realizado y, al mismo tiempo, de la reacción química simulada. Supongamos que partimos de 100 monedas (caras). Como se ha

mostrado previamente (1), el periodo de semi-reacción en este proceso es 1 tirada, por lo que *el modelo predice* la siguiente serie de valores:

Tabla 1. *Valores esperados, según el modelo, en la experiencia CARA → CRUZ, cuando se parte de 100 caras.*

<i>Número de tirada, t</i>	0	1	2	3	4	5
<i>Número de caras, N_c</i>	100	50	25	12,5	6,25	3,125

En esta serie hay incongruencias (aparentes). En la tirada 3 no podemos esperar tener 12,5 caras, y es imposible que en la tirada 4 sean 6,25. El número de caras ha de ser entero. Es importante recordar que lo mismo sucede cuando son moléculas que reaccionan o isótopos que se desintegran, el número ha de ser entero. Esto significa que el modelo empleado no puede predecir con exactitud lo que sucede en la realidad, al menos cuando trabajamos con valores numéricos como estos.

Para encontrar la solución a estas aparentes incongruencias hemos de revisar la naturaleza de la reacción química, como ha hecho recientemente De Levie en un magnífico artículo (2). Si consideramos cada reacción química individualmente, tendremos que reconocer que se trata de un fenómeno aleatorio. Consideremos una molécula térmicamente inestable. Como dice De Levie, ella no sabe cuándo tiene que descomponerse para cumplir con una cinética de orden 1. Simplemente, existe una probabilidad determinada de que se descomponga en una unidad de tiempo, lo que nos lleva a que exista una probabilidad determinada de que una fracción dada de las moléculas presentes se descomponga en una unidad de tiempo. Pero, naturalmente, también existe la posibilidad de que se descomponga algo más o algo menos, cada una de ellas con su correspondiente probabilidad.

En nuestra experiencia con monedas sucede lo mismo. En la tirada 3 hay una probabilidad determinada de que queden 12 caras, pero también hay otras probabilidades determinadas de que queden 11, 13 o 14. La razón última de que el comportamiento sea el mismo es que las experiencias con monedas y las reacciones químicas tienen una esencia común; ambos son procesos de naturaleza probabilística. Este comportamiento similar hace que las experiencias con monedas sean excelentes analogías para los procesos químicos.

En estos procesos probabilísticos, cuando se realizan con números pequeños como los usados en nuestra experiencia, es muy probable que aparezcan fluctuaciones importantes alrededor de la predicción de la curva del ajuste exponencial. Igualmente, es muy probable que dos replicaciones del experimento conduzcan a resultados ligeramente diferentes. Como hemos visto en la figura 1, esto es lo que sucede en la realidad. Esta parte del comportamiento de estos procesos no puede ser descrito

utilizando como modelo la curva del ajuste exponencial. Esta curva sólo describe el comportamiento promedio es la media de las diferentes curvas experimentales (3).

Si se quiere describir el comportamiento cuantitativo detallado de los procesos probabilísticos, incluyendo las fluctuaciones y la variabilidad, se ha de recurrir a modelos estocásticos como los que se han descrito en trabajos previos (3, 4, y referencias incluidas en ellos). No obstante, la elaboración de estos modelos requiere conocimientos de estadística que no poseen la mayoría de los alumnos de primer curso (aunque quizás sí puedan manejar esos modelos).

Una pregunta que puede uno plantearse a continuación es: ¿significa lo dicho hasta ahora que la curva exponencial no sirve ya como modelo para describir la evolución temporal de la concentración de reactivo en un proceso de orden 1?. La respuesta debe ser muy clara en este punto: *la curva del ajuste exponencial es sólo un modelo simplificado, que puede describir una parte de la realidad de los procesos de orden 1, la tendencia general en la evolución temporal, pero que deja sin tratar aspectos que pueden ser relevantes en algunos casos, como son las fluctuaciones y la variabilidad entre experimentos.*

Además, este modelo simplificado es una descripción muy adecuada para la gran mayoría de las reacciones químicas. Imaginemos lo que sucede en una reacción similar a la que hemos considerado antes, una descomposición con un periodo de semirreacción de 1 día, pero en la que trabajamos con las magnitudes que solemos emplear habitualmente en química:

Tabla 2. Valores esperados, según el modelo, en la experiencia $A \rightarrow$ productos, de orden 1, cuando se parte de 0,166 moles de A.

Tiempo, t (días)	0	1	2	3	4
Concentración, N n° moléculas / L	$100 \cdot 10^{21}$	$50 \cdot 10^{21}$	$25 \cdot 10^{21}$	$12,5 \cdot 10^{21}$	$6,25 \cdot 10^{21}$

La magnitud de los números en este caso implica dos cambios importantes:

- 1) El problema de los números no enteros deja de ser importante; $6,25 \cdot 10^{21}$ es un número entero y perfectamente razonable. Sólo aparecen números no enteros cuando la concentración de A es prácticamente 0, y el proceso ya no nos interesa.
- 2) Las fluctuaciones, y la variabilidad, son despreciables cuando se trabaja con números grandes. Como demostró Gillespie (5), las fluctuaciones esperadas en torno al valor medio del número de moléculas en cada momento son del orden de $N^{1/2}$. Esto es, si N es del orden de 10^{22} , las fluctuaciones son del orden de 10^{11} , que es un valor absolutamente despreciable frente a 10^{22} .

Así pues, las deficiencias del modelo simplificado son despreciables cuando trabajamos con números grandes. Y si en la gran mayoría de los casos en química trabajamos con números grandes, ¿para qué necesitamos la discusión anterior sobre la naturaleza de la reacción química y la validez de los modelos simplificados? La respuesta que me gustaría transmitir es que esa discusión es necesaria, a pesar de todo, por tres motivos:

- En primer lugar, porque existen muchos procesos biológicos, de la máxima importancia, que dependen de un número muy bajo de moléculas, a veces menos de 10 o incluso una sola, porque se realizan en el minúsculo volumen de una célula y a muy bajas concentraciones. En estos casos las fluctuaciones y la variabilidad existen y se pueden medir, y además son muy importantes. Según algunos autores, pueden jugar un papel relevante no sólo en el desarrollo de algunas enfermedades, sino también en la evolución de los seres vivos (2, 6). De forma más general, debemos tener en cuenta que la química y la ingeniería química están desplazando su interés hacia escalas cada vez más bajas, donde los efectos estocásticos son cada vez más importantes (7).

- En segundo lugar, porque la discusión permite mostrar la naturaleza aleatoria de la reacción química.

- Finalmente, porque es importante conocer los modelos que utilizamos, saber que son modelos simplificados de la realidad y conocer su rango de validez y los casos en los que no deben emplearse.

3. CONCLUSIONES

- 1) Las experiencias con monedas son muy adecuadas para simular reacciones químicas. Ambos procesos son probabilísticos.
- 2) La curva exponencial que empleamos para describir la evolución temporal en una cinética de orden 1, obtenida del ajuste de los datos experimentales, es un modelo aproximado que resulta adecuado para reacciones que implican un gran número de moléculas.
- 3) Ese modelo aproximado no puede explicar ni predecir las fluctuaciones y la variabilidad que aparecen en los procesos que implican un número pequeño de partículas, procesos de importancia creciente en Química.

REFERENCIAS

1. J. Martínez Urreaga, en *Didáctica de la Química y Vida Cotidiana*, Ed. Sección de Publicaciones E.T.S.I.I.-Universidad Politécnica de Madrid (2003).
2. R. De Levie, *J. Chem. Educ.*, **2000**, Vol. 77, 771.
3. J. Martínez Urreaga, J. Mira y C. González, *Chem. Eng. Educ.*, **2003**, Vol. 36, 14.
4. J. Mira, J. Martínez Urreaga y C. González, *J. Chem. Educ.*, en prensa.
5. D. Gillespie, *Markov Processes: an Introduction for Physical Scientists*, Academic Press, New York (1984).

6. H.H. McAdams y A. Arkin, *Trends in Genetics*, **1999**, Vol. 15 (2), 65.
7. J.B. Rawlings y J.G. Ekerdt, *Chemical Reactor Analysis and Design Fundamentals*, Nob Hill Publishing (2002).

ESTUDIO Y DISEÑO DE UNA PLANTA DE ÁCIDO NÍTRICO MEDIANTE SIMULACIÓN

*Ángel Fernández Tena*¹, *María M. Prieto García*²

¹ Departamento de Ingeniería Química y Textil, Facultad de Ciencias Químicas
Universidad de Salamanca. aftena @usal.es

² Departamento de Estadística, Facultad de Ciencias, Universidad de Salamanca

Se expone una aplicación para microordenador que tiene por finalidad simular un proceso de obtención de ácido nítrico a partir de la oxidación catalítica de amoníaco, destacando las etapas más importantes.

1. INTRODUCCIÓN

El procedimiento empleado actualmente para la producción industrial de ácido nítrico es a partir de la oxidación catalítica del amoníaco (1,2).

Este procedimiento puede desglosarse en los siguientes pasos:

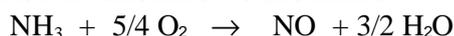
- Oxidación de amoníaco a óxido nítrico.
- Oxidación de óxido nítrico a dióxido de nitrógeno.
- Absorción de los óxidos de nitrógeno formados.
- Depuración de gases residuales.

El primer paso es rápido, mientras que el segundo y tercero son lentos y de ellos depende la capacidad de producción

El último apartado no es fundamental para la producción, pero su consideración es muy importante debido a los problemas de polución atmosférica que puede ocasionar.

Las reacciones que tienen lugar en este proceso son:

- Oxidación del amoníaco a óxido nítrico:



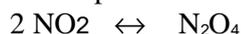
En esta oxidación hay que tener en cuenta que la mezcla amoníaco-oxígeno resulta explosiva en determinados límites, que son función de la presión. En la práctica, la relación entre el oxígeno del aire y el amoníaco sobrepasa el valor de 1,73, para estar fuera de los límites de explosión.

- Oxidación de óxido nítrico a dióxido de nitrógeno.



La reacción es espontánea, pero lenta a presión atmosférica. A temperatura ambiente, el equilibrio está totalmente desplazado hacia la formación de NO₂.

- Equilibrio del peróxido de nitrógeno:



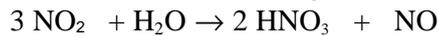
El monóxido de nitrógeno se encuentra en equilibrio con su forma dímera (el tetraóxido de dinitrógeno) y, mientras que el monómero es coloreado, de color

castaño, el dímero es incoloro. Este equilibrio se considera que se alcanza de forma instantánea.

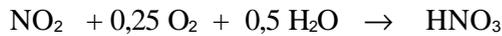
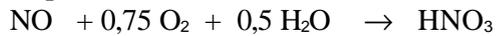
Aunque la forma dímera es la más reactiva, muchos autores sólo consideran el NO_2 equivalente, que se define como:

$$\text{NO}_2 \text{ equivalente} = \text{moles NO}_2 + 2 \cdot (\text{moles N}_2\text{O}_4)$$

- Absorción de los óxidos de nitrógeno:



Es un proceso conjunto de absorción-reacción, pues el dióxido que pasa de la fase gaseosa a la líquida reacciona con el agua, formando ácido nítrico, y produciéndose óxido nítrico, el cual debe ser nuevamente oxidado. Por ello, estas columnas de absorción reciben los nombres de columnas de absorción-oxidación. De forma operativa se puede describir como:



- Depuración de gases residuales:

La adición de una disolución alcalina, como puede ser Na_2CO_3 , permite la depuración de los gases residuales, según las reacciones:



En la Figura 1 se muestra el diagrama de flujo de un proceso de obtención de ácido nítrico, donde aparecen claramente diferenciadas las tres etapas fundamentales del proceso.

La oxidación del amoníaco a óxido nítrico tiene lugar en el convertidor de amoníaco 1, el cual es alimentado por una corriente de amoníaco y otra de aire o aire enriquecido con oxígeno, obteniéndose como productos una mezcla de óxidos de nitrógeno junto con oxígeno, nitrógeno y vapor de agua, que se denominan gases nitrosos.

Estos gases nitrosos sufren un proceso de enfriamiento, en el cambiador de calor 2, como consecuencia del cual se origina un condensado, consistente en ácido nítrico diluido, que es utilizado posteriormente en la torre de absorción 4, como líquido absorbente, y una corriente gaseosa que alimenta a la torre de oxidación 3, de donde los óxidos de nitrógeno se oxidan a dióxido de nitrógeno, denominándose a la corriente de salida gases nítricos.

Estos gases nítricos alimentan a la columna de absorción 4, donde se absorben con el agua y el ácido condensado, indicado anteriormente, obteniéndose el ácido nítrico producto de la instalación y los gases residuales, consistentes en nitrógeno, oxígeno, vapor de agua y el resto de los óxidos de nitrógeno no absorbido.

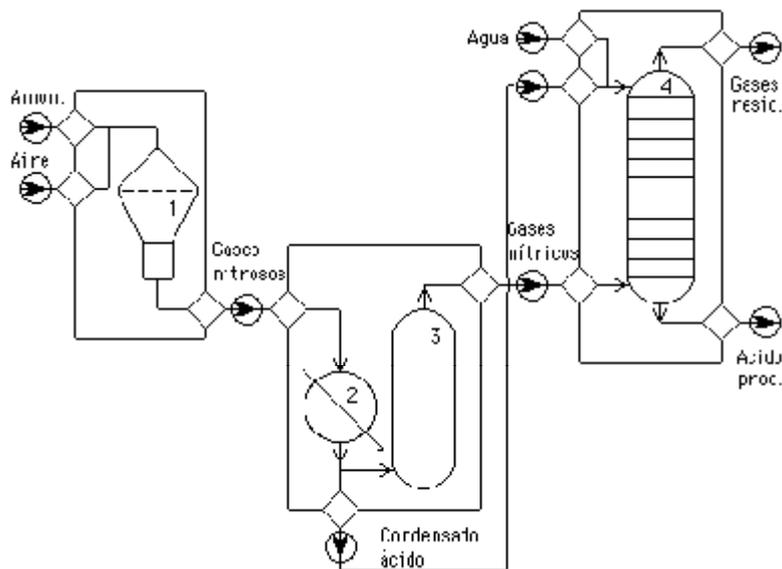


Figura 1. Descripción del proceso según el diagrama de flujo del proceso.

2. SIMULACIÓN

La aplicación tiene por finalidad simular un proceso de obtención de ácido nítrico a partir de la oxidación catalítica de amoníaco, destacando las etapas más importantes anteriormente indicadas.

Al iniciar la simulación sobre pantalla aparece el diagrama de flujo del proceso junto con las opciones, en forma de botones:

- Convertidor de NH_3 .
- Torre de oxidación de NO .
- Columna de absorción-oxidación.

Son opciones que permiten ejecutar cada una de las tres partes en que se divide la simulación.

Las tres partes presentan un paralelismo formal en cuanto a su ejecución. Todas ellas constan de tres pantallas, en la primera de las cuales aparece una información previa relacionada con el apartado elegido, en la segunda aparece el correspondiente diagrama de flujo, donde de forma interactiva se podrán ir fijando, mediante cursores de desplazamiento, los valores de las variables que intervienen en el proceso, obteniéndose por pantalla, de forma inmediata, la respuesta de la simulación a los valores introducidos y finalmente una tercera pantalla donde aparece el balance de materia completo de la etapa elegida, correspondiente a los valores de las variables fijadas.

La simulación está construida de tal manera que el intervalo en el que pueden modificarse los valores de las variables correspondan a casos teóricamente posibles y reales. En esta línea, no se podrá fijar para una variable un valor que no tenga sentido físico o presente inconveniente real de ejecución; así no se podrá fijar una mezcla cuya composición resulte explosiva, como puede ocurrir en el caso de las mezclas amoníaco-oxígeno. En este mismo sentido, cuando se fijan los valores de composición de una mezcla que pase a la torre de oxidación o a la columna de absorción-oxidación, se considera que ésta proviene de la etapa anterior y los márgenes en que su composición puede definirse están limitados por el hecho de que dicha mezcla sea posible; así, en una corriente que entra en la torre de oxidación, que se supone proviene del convertidor, la cantidad de oxígeno debe ser tal que contabilizando el que se ha consumido en la etapa previa, sea como mínimo el que corresponda al nitrógeno presente, cuando ambos componentes formaban parte del aire, aunque evidentemente puede ser mayor pues, mientras que no es razonable utilizar un aire empobrecido de oxígeno, sí que es razonable utilizar aire enriquecido en oxígeno. Tampoco tendría sentido que la corriente gas que alimenta a la columna de absorción-oxidación, no llevase al menos el oxígeno necesario para que todos los óxidos puedan transformarse en ácido.

En el diseño de la simulación, se ha tenido en cuenta de forma fundamental el desarrollo conceptual del proceso más que su aplicación como herramienta de cálculo, aunque se pueda utilizar como tal. En este sentido, se pretende establecer un estudio de la influencia que tienen las diversas variables sobre los resultados obtenidos.

Aunque, como se ha indicado anteriormente, en cada uno de los apartados existe una pantalla inicial con información previa, ésta es sólo a modo de recordatorio y se considera que el alumno posee un conocimiento teórico del proceso considerado.

La simulación tiene muchas posibilidades de ser utilizada como herramienta de estudio, así, además de ver la influencia de las diferentes variables que intervienen en el proceso, el alumno puede comprobar un determinado caso, rehaciendo los resultados obtenidos en pantalla, o puede comprobar que la composición de una corriente que alimenta a una etapa secundaria es de composición razonable, en el sentido de que pudo originarse en una etapa anterior, e incluso determinar en qué condiciones pudo haberse originado, o también comprobar que la composición de la fase gaseosa cumple las condiciones limitantes de saturación impuestas por la presión y temperatura de operación, así como que también se cumplen las constantes de equilibrio en el caso de que estas puedan tener lugar, etc. (3,4).

3. MODO DE OPERACIÓN

A modo de ejemplo, se van a mostrar algunos resultados obtenidos con la simulación. Para ello se ha elegido la etapa inicial del proceso, la correspondiente al convertidor de amoníaco.

CONVERTIDOR DE AMONIACO (Información previa.)

$\text{NH}_3 + 5/4 \text{O}_2 \longrightarrow \text{NO} + 3/2 \text{H}_2\text{O} \quad 54120 \text{ cal/molg.}$

Límites mezclas explosivas.

Presión (ata.)	% NH ₃ vol (aire)	O ₂ /NH ₃ (moles)
1	13.5	1.35
5	12.0	1.54
7	11.5	1.62
10	10.8	1.73

$K_p = P^2 \text{NO}_2 / P^2 \text{NO} \cdot P_{\text{O}_2}$

t°C	K _p
38	1 x 10 ¹¹
200	1 x 10 ⁵
400	1 x 10 ¹
600	1 x 10 ⁻¹
800	1.7 x 10 ⁻³
1000	1.2 x 10 ⁻³

$r = dP_{\text{NO}_2} / dt = k_1 \cdot P^2 \text{NO} \cdot P_{\text{O}_2}$

$\text{Lg } k_1 = 641/T - 0.725$

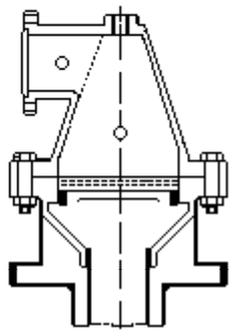
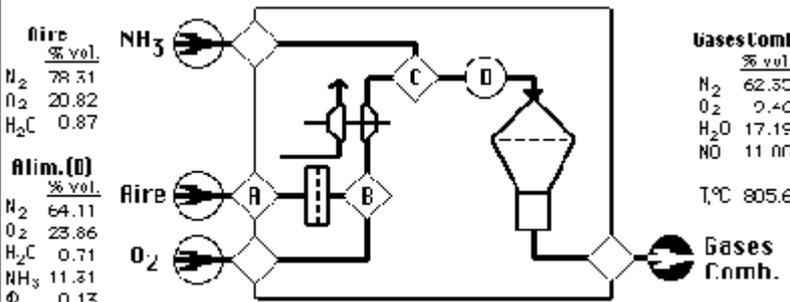




Figura 2. Ventana inicial: información previa.



Aire		NH ₃		Gases Comb.	
% vol.		% vol.		% vol.	
N ₂	78.31			N ₂	62.35
O ₂	20.82			O ₂	9.46
H ₂ O	0.87			H ₂ O	17.19
				NO	11.00

T, °C 805.6

Aire		Alim. (D)		Gases Comb.	
% vol.		% vol.		% vol.	
N ₂	64.11				
O ₂	23.86				
H ₂ O	0.71				
NH ₃	11.31				
φ	0.13				

A Parámetros del aire atmosférico. **C** Relación Oxígeno/Nitro (moles)

P, mmHg 751 2.11

T, °C 25.0 2.11

φ 0.26 2.11

B Relación Aire/Oxígeno (moles) 2.0 2.11

D Valores de P y T en la alimentación

P, mmHg 811 2.11

T, °C 56.2 2.11

Figura 3. Ventana interactiva: datos y resultados.

La primera ventana, ventana informativa, recoge información previa recordatorio correspondiente a esta etapa.

La segunda ventana, es donde se fijan los valores de las variables que definen esta etapa del proceso, al mismo tiempo que se obtiene de forma interactiva los resultados correspondientes a los valores fijados.

La tercera ventana recoge el balance de materia y energía correspondiente a la etapa considerada de acuerdo con los valores fijados.

CONVERTIDOR DE AMONÍACO. (Base de cálculo: 1 mol de amoníaco)											
Aire atmosférico			Alimentación reactor			Gases de combustión					
T, °C	26.0	4	T, °C	36.2	4	T, °C	805.5				
P, mmHg	751		P, mmHg	811		P, mmHg	5795				
	moles	% vol	masa, g		moles	% vol	masa, g		moles	% vol	masa, g
N ₂	5.67	73.31	158.72	N ₂	5.67	64.11	158.72	N ₂	5.67	62.35	158.72
O ₂	1.51	20.82	48.22	O ₂	2.11	23.86	67.52	O ₂	0.96	9.46	27.52
H ₂ O	0.06	0.07	1.14	H ₂ O	0.05	0.71	1.14	H ₂ O	1.56	17.15	20.14
Total Aire			208.00	NH ₃	1.00	11.01	17.00	N ₂	1.00	11.01	30.00
Oxígeno puro											
	moles		masa, g								
	0.60		19.30								
Amoníaco											
	moles		masa, g								
	1.00		17.00								
			Total				Total				Total
			244.37				244.37				244.37
Air./O ₂ , moles	2.00			C _{pe}		C _{ps}		Q _e , cal		701.3	
O ₂ /NH ₃ , moles	2.11			N ₂	6.877	7.777		Q _r , cal		54060.0	
				O ₂	6.936	7.770		Q _p , cal		54761.0	
				H ₂ O	7.912	8.577					
				NH ₃	0.475						
				NO		7.643					

Figura 4. Ventana de los balance de materia y energía.

REFERENCIAS

1. A. Fernández Tena, *Resúmenes de Tesis Doctorales*, Ediciones Universidad de Salamanca (1977).
2. A. Fernández Tena y J.R. Álvarez González, *An. Quím.*, **1980**, Vol. 76, 142.
3. A. Fernández Tena, R. Ardanuy Albajar y M. Prieto García, *Cuadernos de Bioestadística y sus Aplicaciones*, **1992**, Vol. 10 (1), 81.
4. A. Fernández Tena y M. Prieto García, *CalPpsico*, Ed. I.U.C.E., Salamanca (1991).

INTRODUCCIÓN A LA GEOMETRÍA MOLECULAR UTILIZANDO PLASTILINA Y PALILLOS

David Tudela

Departamento de Química Inorgánica, Universidad Autónoma de Madrid
28049-Madrid, david.tudela@uam.es

La realización de una práctica sobre el uso de plastilina y palillos para introducir el concepto de Estructura Molecular y el modelo VSEPR, mejora la visión espacial de los estudiantes y su comprensión de la geometría molecular, así como sus resultados académicos. Mientras que la construcción de modelos moleculares por parte de los estudiantes, utilizando plastilina y palillos, ayuda a mejorar sus habilidades de percepción espacial, la analogía de los palillos pinchados en la plastilina como modelos de los dominios de electrones alrededor de un átomo central, permite una mejor comprensión del modelo VSEPR.

1. INTRODUCCIÓN

Aunque se espera que los estudiantes de Química adquieran una comprensión profunda de la geometría molecular en su primer año de estudios universitarios, una gran parte de ellos presenta serias deficiencias que afectan negativamente a la comprensión de diversas asignaturas. Uno de los puntos más débiles de los alumnos es el relacionado con las habilidades de percepción espacial. Es decir, los alumnos memorizan estructuras y las dibujan en un plano sin ser capaces de visualizarlas en tres dimensiones. Existe bastante preocupación en todo el mundo respecto a las habilidades de percepción espacial, habiéndose publicado diversos artículos en la revista *Journal of Chemical Education* (1-5). Es interesante señalar que, en ausencia de un entrenamiento específico con modelos estructurales, las chicas tienen más dificultades de visión espacial que los chicos (2, 3), mientras que, después de dicho entrenamiento, ambos grupos mejoran y disminuyen las diferencias entre ellos (3). Las dificultades de visualización tridimensional de los estudiantes conducen a errores conceptuales sobre la geometría y polaridad de las moléculas (5, 6). Por tanto, el trabajo con modelos estructurales es de la máxima importancia. Pero no basta con ver los modelos, sino que el mayor aprovechamiento posible se consigue si el estudiante construye el modelo y lo manipula él mismo (7).

Las estructuras de Lewis, con las correspondientes estructuras resonantes en su caso, nos indican el número de enlaces (incluyendo su orden de enlace) y de pares solitarios alrededor de un átomo central. La distribución de dichos enlaces y pares solitarios en el espacio conduce a la estructura molecular. El modelo más sencillo para predecir y racionalizar la geometría de las moléculas es el de la “*Repulsión de los Pares Electrónicos de la Capa de Valencia*” (VSEPR) (8) que, en su forma más

simple, establece que los dominios de electrones (enlaces, sea cual sea su orden de enlace, y pares solitarios) se distribuyen alrededor del átomo central de forma que se minimicen las repulsiones entre ellos; es decir, estén lo más alejados posible entre sí. De esta manera, para los diferentes números de enlaces y pares solitarios, se llega a las geometrías indicadas en la Tabla 1.

Tabla 1. Estructura de las moléculas en función del número de dominio de electrones (enlaces y pares solitarios).

D.E. ^a	ENLACES	P.S. ^b	ESTRUCTURA	ÁNGULOS	EJEMPLO
2	2	0	LINEAL	180°	BeH ₂
3	3	0	TRIGONAL PLANA	120°	BF ₃
3	2	1	ANGULAR	< 120°	SnCl ₂
4	4	0	TETRAÉDRICA	109.5°	CH ₄
4	3	1	PIRÁMIDE TRIGONAL	< 109.5°	NH ₃
4	2	2	ANGULAR	< 109.5°	H ₂ O
5	5	0	BIPIRÁMIDE TRIGONAL	90°, 120° y 180°	PF ₅
5	4	1	BIASFENOIDE	< 90°, < 120° y < 180°	SF ₄
5	3	2	ESTRUCTURA EN "T" DEFORMADA	< 90° y < 180°	ClF ₃
5	2	3	LINEAL	180°	XeF ₂
6	6	0	OCTAÉDRICA	90° y 180°	SF ₆
6	5	1	PIRÁMIDE DE BASE CUADRADA	< 90° y < 180°	BrF ₅
6	4	2	PLANOCUADRADA	90° y 180°	XeF ₄

^aDominios de electrones. ^bPares solitarios.

La forma tradicional de enseñar los principios de Estructura Molecular (modelo VSEPR) parte de la Tabla 1, que los estudiantes memorizan sin una adecuada comprensión de la misma. Además, muchos estudiantes tienen dificultades de percepción espacial, son incapaces de crear imágenes tridimensionales de lo que tienen dibujado en un papel, y no relacionan los dibujos de las moléculas en un plano con su estructura tridimensional. Al ser preguntados sobre si la primera imagen que aparece en su mente al mencionarles una molécula determinada es la visión de su estructura o el texto que la describe, muchos estudiantes reconocen que es el texto que previamente han memorizado. Esta memorización, carente de comprensión, conduce a diversas incongruencias como que dibujen una molécula A-B-A lineal acompañada de

un texto que indica que es angular, o incluso que digan que es angular con un ángulo de 180° .

Aunque se han propuesto diversas analogías para ayudar a visualizar el modelo VSEPR (9), un método muy adecuado para mejorar las habilidades de visión espacial de los estudiantes y su comprensión de la estructura molecular es el uso de modelos construídos por ellos mismos con plastilina y palillos (10). A la conocida mejora de las habilidades espaciales tras los entrenamientos con modelos, se añade una mejora adicional pues los estudiantes no sólo manipulan modelos estructurales sino que los construyen ellos mismos. Se avanzan así pasos en el camino: Estructura dibujada en papel \rightarrow Visión de modelos tridimensionales \rightarrow Manipulación de los modelos \rightarrow Construcción de los modelos. La combinación de este procedimiento con la visualización de vídeos o modelos estructurales en la pantalla de un ordenador, permite a los estudiantes relacionar las estructuras que dibujan en papel con las imágenes que ven en pantalla y con los modelos tridimensionales que tienen en sus manos, adquiriendo las competencias básicas de percepción espacial imprescindibles para el estudio de la Química. En la experiencia que se describe a continuación, los estudiantes van insertando palillos (la analogía de dominios de electrones) en una bola de plastilina (átomo central), buscando la posición de máxima distancia (mínima repulsión) entre los mismos. De esta manera, los estudiantes deducen las geometrías correspondientes a diferentes números de enlaces y pares solitarios, y rellenan ellos mismos una tabla en blanco hasta obtener los datos de la Tabla 1, construyendo su propio conocimiento de estructura molecular. El objetivo de esta experiencia es mejorar la visión espacial y los conocimientos de estructura molecular (aplicación del modelo VSEPR) de los estudiantes.

2. PROCEDIMIENTO

Comenzando con un palillo insertado en una bola de plastilina, se pide a los estudiantes que inserten un segundo palillo, lo más alejado posible del primero, con lo que resulta una disposición lineal, con un ángulo de 180° , que los estudiantes apuntan en su tabla en blanco. A continuación, se pide a los estudiantes que inserten un tercer palillo, lo más alejado posible de los otros dos (lo colocan perpendicular a ellos), y relajen los ángulos de forma que los tres palillos se alejen lo más posible entre sí. El resultado es una estructura triangular plana con ángulos de 120° . En el caso de algunos estudiantes, con conocimientos muy pobres de geometría, puede ser necesario preguntarles cuántos grados corresponden a una circunferencia completa (360°) y cuántos corresponden a cada uno de los tres fragmentos en que se divide en el triángulo equilátero, para que deduzcan que el ángulo es de 120° .

Partiendo de los tres palillos, con disposición trigonal plana, se pide a los estudiantes que retiren uno de ellos para modelizar el caso en que uno de los tres dominios de electrones no es un enlace sino un par solitario (se puede deformar la plastilina para señalar la posición del par solitario donde anteriormente había un

palillo). El resultado es una disposición angular de los dos enlaces, con un ángulo de enlace próximo a 120° (el que corresponde a tres dominios de electrones). Una aplicación más detallada del modelo VSEPR (mayor repulsión del par solitario que de los enlaces, en el caso de enlaces sencillos) lleva a la conclusión de que, generalmente, el ángulo se cerrará alcanzando valores menores de 120° (una excepción es NO_2 en que los dos enlaces son de orden 1.5 y en vez de un par solitario hay un electrón solitario, que causa menos repulsión, por lo que el ángulo se abre hasta un valor de $134,3^\circ$).

Volviendo a la situación de tres palillos insertados con una disposición trigonal plana, se pide a los estudiantes que inserten un cuarto palillo en la posición más alejada de los otros tres (perpendicularmente al plano) y relajen los ángulos de forma que todos los palillos estén lo más alejados posible entre sí. El resultado es una disposición tetraédrica con ángulos de $109,5^\circ$. En el caso de que uno de los cuatro dominios de electrones sea un par solitario, se retira uno de los palillos (y se deforma ligeramente la plastilina en la dirección del par solitario), resultando una estructura de pirámide trigonal, con ángulos de enlace próximos a los $109,5^\circ$ que corresponden a los cuatro dominios de electrones. Una aplicación más detallada del modelo VSEPR lleva a la conclusión de que generalmente el ángulo se cerrará alcanzando valores menores de $109,5^\circ$ (una excepción es ClO_3 cuya estructura de Lewis que minimiza las cargas formales contiene tres enlaces dobles y un electrón solitario en el átomo de cloro, por lo que el ángulo se abre hasta un valor de $113,5^\circ$).

Partiendo de la situación anterior, pirámide trigonal derivada de un tetraedro en que uno de los dominios de electrones es un par solitario, se retira otro palillo (y se deforma la plastilina en la dirección del nuevo par solitario) para modelizar la situación correspondiente a dos enlaces y dos pares solitarios. El resultado es una disposición angular con ángulos próximos a $109,5^\circ$ (correspondientes a cuatro dominios de electrones) que generalmente se cerrarán siendo menores de $109,5^\circ$ (una excepción es ClO_2 cuya estructura de Lewis que minimiza las cargas formales contiene dos enlaces dobles, un par solitario y un electrón solitario en el átomo de cloro, por lo que el ángulo se abre hasta un valor de $117,6^\circ$). Al pasar los resultados a su tabla, es importante que los estudiantes noten la diferencia entre una estructura angular resultante de tres dominios de electrones (dos enlaces y un par solitario) con ángulo próximo a 120° , y una resultante de cuatro dominios de electrones (dos enlaces y dos pares solitarios) con ángulos próximos a $109,5^\circ$.

Volviendo a la situación de cuatro palillos insertados con una disposición tetraédrica, se pide a los estudiantes que inserten un quinto palillo en la posición más alejada posible de los demás. Tras probar diferentes posibilidades, los estudiantes comprueban que dicha posición es en la dirección opuesta a uno de los palillos y perpendicular a la cara del tetraedro que definen los otros tres palillos. En este momento, hay tres palillos más próximos al palillo entrante que al otro. Al relajar los ángulos, para que todos los palillos estén lo más alejados posible entre sí, resulta una estructura de bipirámide trigonal. Puesto que las estructuras que derivan de una

bipirámide trigonal son las más difíciles de visualizar por parte de los estudiantes, es importante que se tomen el tiempo necesario para comprobar que en una bipirámide trigonal hay dos tipos de posiciones (axiales y ecuatoriales) y que los diferentes ángulos de enlace son de 90° (axial-ecuatorial), 120° (ecuatorial-ecuatorial) y 180° (axial-axial). Es también muy importante notar que el menor ángulo de enlace (máxima repulsión entre los correspondientes dominios de electrones) es de 90° y que las posiciones axiales tienen tres dominios de electrones a 90° , mientras que las posiciones ecuatoriales solo tienen dos dominios de electrones a 90° . Por tanto, las posiciones axiales sufren una mayor repulsión y los dominios de electrones que ejerzan una mayor repulsión (pares solitarios y enlaces múltiples) ocuparán las posiciones ecuatoriales.

Para modelizar una estructura en que el átomo central tenga cuatro enlaces y un par solitario, se parte de la bipirámide trigonal (correspondiente a cinco dominios de electrones) y se quita un palillo de una posición ecuatorial (y se deforma la plastilina en la dirección del par solitario), resultando una estructura semejante a un bifenóide con ángulos de enlace próximos a los correspondientes a una bipirámide trigonal (90° , 120° y 180°), pero generalmente menores por la repulsión del par solitario. Al quitar un nuevo palillo de las posiciones ecuatoriales (y deformar la plastilina en la dirección del nuevo par solitario), para modelizar la estructura correspondiente a tres enlaces y dos pares solitarios, los estudiantes suelen preguntar el nombre de la nueva estructura. Al decirles que tomen la estructura por el palillo de la posición ecuatorial, con los palillos axiales hacia arriba y paralelos al suelo, e indiquen a qué letra se parece esa estructura, los estudiantes reconocen la letra “T”, por lo que la estructura recibe el nombre de “T deformada”. La deformación proviene de la repulsión de los pares solitarios que cierra los ángulos a valores $< 90^\circ$ (axial-ecuatorial) y $< 180^\circ$ (axial-axial). Si algún alumno pregunta por qué este último ángulo es $< 180^\circ$ y no $> 180^\circ$, se le dibuja un ángulo de 90° y se le pregunta su valor; a su respuesta de 90° se le vuelve a preguntar “¿y por qué no de 270° ?”, con lo que su pregunta anterior quedará contestada.

Para modelizar la estructura correspondiente a dos enlaces y tres pares solitarios, se parte de la estructura en “T”, preferentemente no deformada (ángulos de 90° y 180°), y se quita el palillo que queda en la posición ecuatorial (deformando la plastilina en la dirección del nuevo par solitario), resultando una estructura lineal con un ángulo de exactamente 180° . Algunos estudiantes se preguntan si la repulsión de los pares solitarios no distorsionará la estructura lineal, pero es fácil hacerles comprender que cada uno de los pares solitarios tenderá a desviar los enlaces a la dirección contraria, pero que al ejercer los tres pares solitarios exactamente la misma repulsión, sus fuerzas se anulan, no existiendo ninguna distorsión de la estructura lineal.

Volviendo a la situación de cinco palillos insertados con una disposición de bipirámide trigonal, se pide a los estudiantes que inserten un sexto palillo en la posición más alejada posible de los demás. Tras probar diferentes posibilidades, los

estudiantes comprueban que dicha posición es en la dirección opuesta a uno de los enlaces ecuatoriales, bisecando el ángulo de 120° de los otros dos. En este momento, hay dos palillos (ecuatoriales) más próximos al palillo entrante que al que forma una recta con él. Al relajar los ángulos, para que todos los palillos se alejen lo más posible entre sí, resulta una estructura octaédrica con ángulos de 90° y 180° . Al quitar un palillo al octaedro, para modelizar la estructura correspondiente a cinco enlaces y un par solitario (deformando la plastilina en la dirección del par solitario), los estudiantes ven claramente la forma de pirámide de base cuadrada, siempre que la miren con el par solitario hacia abajo (en caso contrario parecería un paraguas). La deformación producida por el par solitario conduce a ángulos inferiores a 90° y 180° . Mientras que el primer par solitario podía colocarse en cualquier vértice del octaedro (puesto que todos los vértices son idénticos), un segundo par solitario debe colocarse en la posición opuesta al primero para minimizar las repulsiones, por lo que al quitar el correspondiente palillo (y deformar la plastilina en la dirección del nuevo par solitario), para modelizar la estructura correspondiente a cuatro enlaces y dos pares solitarios, resulta una estructura planocuadrada con ángulos de exactamente 90° y 180° (los dos pares solitarios ejercen exactamente la misma repulsión en sentidos opuestos, por lo que sus efectos se anulan).

Una vez que los estudiantes han sido capaces de reproducir la Tabla 1, rellenando su tabla en blanco, trabajando en pequeños grupos e interaccionando con los profesores, es aconsejable que se lleven la plastilina y los palillos a su casa y allí repitan el proceso trabajando en solitario. Es también muy importante que manipulen todas las estructuras y relacionen el dibujo bidimensional de la estructura en el papel, pizarra o transparencia con el modelo tridimensional que ellos mismos han creado. Cuando los estudiantes comprenden la utilidad de los modelos moleculares contruidos con plastilina y palillos, es frecuente que los sigan utilizando en su casa para construir modelos de moléculas sencillas de las que estudian en diferentes asignaturas. Con plastilina de diferentes colores pueden estudiar la quiralidad de moléculas tetraédricas viendo cuales son superponibles con su imagen especular. Una gran ventaja del uso de plastilina y palillos, respecto a modelos comerciales, es (además de su precio) que los ángulos se pueden modificar para modelizar procesos dinámicos como la transformación entre una estructura tetraédrica y una plano cuadrada, la inversión de amoníaco o aminas, el mecanismo de sustitución S_N2 en centros tetraédricos, o el mecanismo de pseudo-rotación de Berry para el intercambio entre posiciones axiales y ecuatoriales en estructuras de bpirámide trigonal.

3. COMENTARIOS

La experiencia descrita se ha llevado a cabo, durante tres cursos académicos, con grupos de estudiantes voluntarios, fuera del horario de clase habitual, en la asignatura “Enlace Químico y Estructura” de primer curso de la Licenciatura de Química de la Universidad Autónoma de Madrid. Los alumnos que participaron en la

experiencia mostraron un excelente interés y participación, resultando un ambiente de trabajo extraordinario. Los alumnos manifestaron su satisfacción por el aprendizaje conseguido durante el desarrollo de la experiencia y la mejora en el aprendizaje se manifestó cuantitativamente en los exámenes correspondientes. Al tratarse de una experiencia voluntaria, no es sorprendente que los alumnos que asistieron a la misma sean los más motivados y que esta motivación se refleje en unos mejores resultados académicos. Por consiguiente, la obtención de mejores calificaciones promedio por parte de los estudiantes que participaron en la experiencia, respecto a los que no lo hicieron (grupo de control), no demuestra necesariamente el efecto beneficioso de la misma. Sin embargo, al dividir la calificación obtenida en las preguntas de contenido estructural entre la obtenida en el resto de preguntas del examen, se elimina el efecto de la motivación intrínseca de los estudiantes y se pone de manifiesto una mejora evidente en el aprendizaje de los alumnos que realizaron la experiencia. Por tanto, se puede concluir que la realización de una práctica sobre el uso de plastilina y palillos para introducir el concepto de Estructura Molecular y el modelo VSEPR, mejora la visión espacial de los estudiantes y su comprensión de la geometría molecular, así como sus resultados académicos. Algunos consejos adicionales se incluyen a continuación.

La práctica se puede realizar en el propio aula durante la hora de clase. Para aprovechar el tiempo al máximo, es conveniente llevar preparadas bolas de plastilina con seis palillos pinchados para todos los estudiantes. En el caso de grupos numerosos, es también conveniente que asista más de un profesor para atender las consultas de los estudiantes de forma personalizada.

Aunque cada estudiante debe tener su propio material, es conveniente que trabajen en grupos de 2 ó 3 personas (lo suelen hacer espontáneamente) para aprovechar las ventajas del aprendizaje cooperativo.

La práctica resulta económica (menos de 0,1 € por estudiante): con un bloque de plastilina se pueden cortar fragmentos a unos 20 estudiantes y con una caja de 1000 palillos hay para más de 150. A esto habría que añadir las fotocopias con la tabla en blanco que deben rellenar los estudiantes. Se debe permitir que los estudiantes se lleven el material utilizado a su casa para que puedan continuar practicando y creando modelos estructurales de diferentes moléculas.

Aunque la práctica completa debe realizarse durante el primer año de estudios universitarios, la introducción de la analogía y la construcción y manipulación de modelos construidos con plastilina y palillos, resultaría muy útil a los alumnos de Bachillerato.

AGRADECIMIENTOS

Parte de este trabajo es el resultado de un Proyecto de Innovación Docente de la Universidad Autónoma de Madrid (2001), titulado *Visión Espacial y Comprensión*

de la Estructura Molecular en Alumnos de Química, en el que también participó la Dra. M^a. José Camazón Carballo.

REFERENCIAS

1. S.E. McKay y S.R. Boone, *J. Chem. Educ.*, **2001**, Vol. 78, 1487.
2. S.L. Coleman y A.J. Gotch, *J. Chem. Educ.*, **1998**, Vol. 75, 206.
3. H.D. Barke, *J. Chem. Educ.*, **1993**, Vol. 70, 968.
4. H. Tuckey, M. Selvaratnam y J. Bradley, *J. Chem. Educ.*, **1991**, Vol. 68, 460.
5. C. Furió y M.L. Calatayud, *J. Chem. Educ.*, **1996**, Vol. 73, 36.
6. J.P. Birk y M.J. Kurtz, *J. Chem. Educ.*, **1999**, Vol. 76, 124.
7. M.D. Roadruck, *J. Chem. Educ.*, **1993**, Vol. 70, 1025.
8. B.W. Pfennig y R.L. Frock, *J. Chem. Educ.*, **1999**, Vol. 76, 1018.
9. J.P. Birk y S. Abbassian, *J. Chem. Educ.*, **1996**, Vol. 73, 636.
10. D. Tudela, *Educ. Chem.*, **1997**, Vol. 34, 42.

LA SIMULACIÓN Y/O EL JUEGO DE ROL COMO ESTRATEGIA PARA COMUNICAR CIENCIA: PROYECTO APQUA¹

Imma Ros Clavell

Departament d'Ensenyament Generalitat de Catalunya. iros1@ense.gencat.es

*”La Ciencia la hacen los científicos pero sus consecuencias,
positivas o negativas, afectan a todas las personas”*

1. PROYECTOS C-T-S

Uno de los objetivos fundamentales de los proyectos Ciencia-Tecnología-Sociedad (C-T-S) es que los alumnos aprendan a tomar decisiones. Se pretende despertar en ellos el interés por las cuestiones relacionadas con la actividad humana, adquiriendo nuevos y suficientes conocimientos que les ayuden a analizar las distintas concepciones científicas teniendo en cuenta el contexto cultural e ideológico en el que surgieron y al mismo tiempo tener presente en el currículum, la dimensión ecológica y los valores humanos (políticos, morales, estéticos,...).

La metodología se basa en que debe saber utilizarse la información y, para ello, se da información sobre los contenidos de la materia ligada a un conjunto de experiencias experimentales o virtuales, a unos textos que se correspondan con los contenidos curriculares y realizar distintas secuencias de prácticas de laboratorio o trabajos de recogida de datos.

En este sentido, debe tenerse presente que *“si la información no sabe utilizarse para tomar decisiones, sirve de muy poco. Informar no quiere decir educar”*.

Los productos químicos están relacionados con la mayor parte de las preocupaciones actuales sobre el medio ambiente. Al respecto, hay que considerar que:

- El riesgo es la principal causa de preocupación de la sociedad
- El riesgo cero no es posible
- Vivimos en un mundo que quiere seguridad

2. ¿QUÉ ES APQUA?

APQUA es el acrónimo de *Aprendizaje de Productos Químicos, sus Usos y Aplicaciones*. Se trata de un proyecto de culturización científica dirigido a toda la población, centrado en los productos y los procesos químicos y en el riesgo que su uso representa para las personas y para el medio ambiente.

Los objetivos principales de APQUA son:

- Desarrollar una mayor conciencia, un conocimiento y una comprensión pública mayor de los productos químicos y de cómo éstos interaccionan con nuestras vidas. Promover el uso de principios y procesos científicos, y de la evidencia en la toma de decisiones.

- Suministrar a las personas los conocimientos y las herramientas necesarios para que puedan tomar sus propias decisiones y participar de manera más efectiva como miembros de una sociedad libre y democrática.

- Conseguir que las personas aprendan a obtener información sobre todo aquello que les preocupa en relación con la Ciencia que les rodea.

APQUA es el resultado de la colaboración entre el Departamento de Ingeniería Química de la URV (Universidad Rovira i Virgili) y el programa SEPUP (*Science Education for Public Understanding Program*) del *Lawrence Hall of Science* de la Universidad de California en Berkeley.

APQUA desarrolla distintos programas:

- Programa escolar dirigido a alumnos de la Educación Obligatoria (10 a 16 años).
- Programa público dirigido a la población adulta.
- Programa de formación de profesionales.
- Centro de información química.

Nos centraremos en reseñar las características principales que caracterizan el primero de ellos.

El programa escolar pretende que los alumnos cuestionen sus ideas sobre los productos químicos y el medio que los rodea en los usos o aplicaciones que nuestra sociedad les da.

Es un proyecto educativo que cree que estar bien informado es necesario para poder tomar decisiones y participar de forma responsable en la formulación de cualquier política relacionada con la Ciencia y la Tecnología.

APQUA cree que el aprendizaje de las ciencias en el aula no significa sólo leer un libro sino realizar actividades, preguntas, discusiones e involucrarse en debates y para ello utiliza la simulación de una historia en la que se plantea una situación problemática, en la que la Ciencia muestra la evidencia del problema pero en la que las tomas de decisiones para paliarlo por parte de la sociedad pueden ser distintas.

Las actividades de trabajo plantean preguntas abiertas y situaciones simuladas. El alumno se da cuenta que los temas de Ciencia y Tecnología son cuestiones sobre las cuales las personas toman decisiones, como individuos miembros de una sociedad.

Los distintos créditos que actualmente forman el programa escolar son:

- *Primer bloque*

Investigan lo que entienden los alumnos/as por el termino producto químico para posteriormente tratar dos situaciones diferentes de contaminación de agua (superficial por ácidos y acuíferos por pesticidas). Incluye los epígrafes:

- Los productos químicos.
- Disoluciones y contaminación.
- Contaminación del agua subterránea del pueblo de Valfrondoso.

- *Segundo bloque*

Plantea inicialmente el concepto de riesgo, a partir de situaciones de la vida cotidiana, sobre la posible toxicidad de un aditivo alimentario, tratamiento de residuos de metales pesados en solución producidos por una empresa, así como deben tratarse los distintos residuos que genera la sociedad. Consta de los apartados:

- Riesgo: el juego de la vida.
- Toxicología. Determinación de valores umbral.
- Tratamiento de residuos especiales.
- La jerarquía de la gestión de residuos.

3. MÓDULO DE TRATAMIENTO DE RESIDUOS ESPECIALES

A título de ejemplo, desarrollaremos la concreción del modulo de Tratamiento de residuos especiales (segundo ciclo de E.S.O.) como crédito variable (30 h).

La filosofía del crédito será la del “método del caso”, a través del cual se estudiarán las distintas alternativas entre las que los alumnos deberán decidir para afrontar un problema ecológico.

Para ello, deberán estudiar el proceso tecno-científico y no el proceso cerrado que presenta los resultados como si fuesen naturales (lineales, lógicos, objetivos y evidentes).

Los alumnos deberán entender y comprender las interpelaciones entre Ciencia-Tecnología-Sociedad y la educación en valores.

Así mismo, deberán desarrollar su sentido de responsabilidad paralelamente a su formación como ciudadanos, para que sean capaces de comprender fenómenos complejos, reflexionar y elaborar juicios de valor propios, formularse preguntas que representen un papel decisivo en la sociedad y que representen una repercusión importante sobre los derechos fundamentales y las libertades individuales, al mismo tiempo que los estimule para aprender a tomar decisiones y participar activamente en la vida social.

Introduciremos el tema planteando nuestras dudas sobre cómo la sociedad toma decisiones y para ello plantearemos el “caso” como aquél en que alumnos asumen el papel de ingenieros de una consultoría medioambiental a los que se les plantea la necesidad de decidir cuál es la mejor manera de tratar una solución residual que contiene cobre, generada por el cierre de una empresa de galvanotecnia.

Comparan los métodos de disolución, sustitución, precipitación e inertización, teniendo en cuenta no solo su efectividad sino también el coste y el impacto ambiental.

Durante la realización de las siete actividades de que consta el crédito, los alumnos:

1. Utilizan la solución de cloruro de cobre (II) para recubrir un clip de níquel y se les plantea el problema del tratamiento de la solución usada que contiene un metal tóxico.
2. Determinan el volumen de agua necesario para disolver una cantidad determinada de la solución residual de cloruro de cobre (II), teniendo en cuenta la normativa sobre aguas de una hipotética localidad. Realizan un ensayo para determinar la presencia de iones de cobre en solución.
3. Investigan el uso de aluminio como método para recuperar el cobre. Realizan una reacción de sustitución.
4. Investigan si otros metales (hierro, zinc, etc.) recuperarán el cobre tal como lo ha hecho el aluminio y determinen cuál de ellos es el más efectivo considerando el coste económico y la toxicidad de cada uno de ellos para decidir cual es el más adecuado.
5. Observan y separan el precipitado sólido que se produce al mezclar la solución residual de cloruro de cobre (II) con otras. Determinan cuál de las reacciones de precipitación es más efectiva para eliminar los iones cobre. Posteriormente, simulan los efectos de la “lluvia ácida” sobre los precipitados depositados en un vertedero imaginario.
6. Realizan la inertización de los iones cobre con cemento Portland y silicato de sodio. Investiguen el grado de lixiviación de los iones de cobre provocados para una lluvia ácida imaginaria.
7. Comparan, mediante la ayuda de una tabla de doble entrada, las ventajas e inconvenientes de cada método estudiado en relación con la destinación final del residuo, la facilidad de realización del proceso, el coste y las preguntas generales relacionadas con el medio.
8. Toman una decisión.

4. TOMA DE DECISIONES

Según Méndez (1) La toma de decisiones es una constante en nuestras vidas pero, ¿cómo podemos participar en la toma de decisiones que alguien toma por nosotros?. Cualquiera de las cosas que hacemos no deja de ser un cúmulo de decisiones ya tomadas por alguien. Obviamente suponemos, sabemos, etc. que “alguien” se ha preocupado de comprobar todo aquello que es “comprobable” y que este “alguien” es competente.

A partir de estas premisas podemos preguntar a los alumnos:

- ¿En que nos basamos para tomar decisiones?

- ¿Cómo las legitimamos?
- ¿Es la racionalidad científica la manera más segura tanto para legitimar como para tomar decisiones?
- ¿Es conveniente participar en las decisiones que alguien ha tomado por nosotros? ¿Es posible?
- ¿Por qué y en qué medida nos afecta que existan conflictos y divergencias entre las decisiones que toman los “expertos” respecto a un mismo asunto?
- ¿Qué sucede?, cuando el conflicto aparece entre valores distintos como:
 - Libertad e igualdad.
 - Reducir o aumentar la producción.
 - Producción y contaminación.
 - Expertos o sociedad democrática.
 - Incentivar la producción o el bienestar de los trabajadores.
 - Riesgo percibido y estadístico.

Las respuestas pasan por entender y comprender las relaciones C-T-S. La sociedad crea, modifica e interpreta la tecnología con la intención de satisfacer sus necesidades y mejorar sus condiciones de vida. La actividad científico-tecnológica modifica la sociedad, la vertebrada de forma diferente, cambia sus capacidades expresivas y comunicativas, los valores, las creencias y los deseos de sus componentes.

La Ciencia, en todos los niveles educativos, enseña que la realidad es de una manera y que siempre hay alguien (profesor, científico,...) que la conoce mejor que el alumno.

La Ciencia parece omnipotente: los temas y problemas planteados en los libros de texto y en las prácticas de laboratorio presentan una única solución. Casi nunca se discute por qué se escoge una de las soluciones y no otra de entre todas las posibles.

El proceso de socialización tecno-científica ignora las relaciones C-T-S y esto se traduce en una formación realizada en compartimentos estancos de manera que no permite tener una visión global, ni consolidar una preparación para poder evaluar los contextos, argumentos y consecuencias que tienen que ver con su formación como ciudadanos, como futuros profesionales y como personas que han de saber tomar decisiones.

La tecnología no puede entenderse como un conjunto de herramientas, puesto que esto crea un déficit de cultura tecnológica, ya que no permite comprender cómo la sociedad configura la tecnología al mismo tiempo que la tecnología construye la sociedad.

Para finalizar quisiera recordar unas palabras de J. Wagensberg(2):

“En Ciencia todo se basa en la conversación. Experimentar y observar es conversar con la naturaleza, inventar y reflexionar es conversar con uno mismo y trabajar en equipo pasa por conversar con compañeros, profesores y alumnos. Por tanto, es necesario saber expresarse, saber escuchar, saber convencer y reconocer

los errores y los aciertos, los de uno mismo y los de los otros. Deberemos entrenar a nuestros alumnos en estas habilidades”.

5. EQUIPO DEL PROGRAMA APQUA

Magda Medir es la directora del programa APQUA “Aprendizaje de los productos químicos sus usos y aplicaciones”, APQUA (1988-2003). Es además asesora científica del programa SEPUP (*Science Education for Public Understanding Program*), del *Lawrence Hall of Science* en la Universidad de California en Berkeley, USA.

Herbert D. Thier es el director y fundador del programa SEPUP.

Los colaboradores científicos del programa APQUA son: Jordi Gavaldà, Francesc Giralt, Jordi Grifoll, Montse Abelló, Enric Antón, Carlos Lozano, Santiago Rodríguez, Ignasi Papell, Natàlia Garriga e Imma Ros.

REFERENCIAS

1. R. Méndez y À. Àlvarez, *Educando en valores a través de C-T-S*, Ed. Desclée De Brouwer (1999).
2. J. Wagenswerg, Director del Museo de la Ciencia de Barcelona, *Comunicación*.