

# Simulación del establecimiento del equilibrio químico utilizando una hoja de cálculo

Antonio Tomás Serrano

**Resumen:** Existen muchas simulaciones acerca de cómo una reacción química, en las condiciones establecidas, puede alcanzar una situación de equilibrio dinámico. En el trabajo que se presenta a continuación, partiendo de una de estas simulaciones, diseñamos una hoja de cálculo que muestra cómo varían las concentraciones de los componentes del sistema, desde una situación inicial de no equilibrio hasta otra final de equilibrio.

**Palabras clave:** equilibrio químico, simulación, perturbación del equilibrio, hoja de cálculo.

**Abstract:** There are many simulations about how a chemical reaction, provided the established conditions, can reach a situation of dynamic equilibrium. In the present study we will show how, taking as a basis one of these simulations, we design a spreadsheet that shows how the concentrations of the components of a system change, from an initial situation of non-equilibrium, to a final one of equilibrium

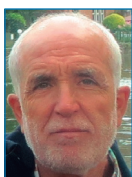
**Keywords:** chemical equilibrium, simulation, disturbance of equilibrium, spreadsheet.

## INTRODUCCIÓN

Cuando ocurre una reacción reversible en un recipiente cerrado, en el que se mantiene constante la temperatura, llega un momento en el que las velocidades de los procesos directo e inverso se igualan. Se llega así a una situación de equilibrio dinámico, en la que las concentraciones de las especies que intervienen permanecen constantes, a pesar de que los procesos directo e inverso no se detienen en ningún momento.

Esta condición de equilibrio se alcanza sea cual sea la composición inicial de la mezcla de reacción y aunque la composición de la mezcla final dependerá de las condiciones iniciales de partida, hay una determinada relación entre las concentraciones de los componentes, llamada *constante de equilibrio*, que permanece invariable mientras no se modifique la temperatura del sistema.<sup>[1]</sup>

Otra característica del equilibrio dinámico es que cuando sufre una perturbación, tal como una alteración de la concentración de algún componente, el equilibrio vuelve a restablecerse transcurrido un cierto tiempo, esto es, a pesar de que varían las concentraciones de todos los componentes, sigue existiendo una relación constante entre ellas.



A. Tomás Serrano

I.E.S. Vega del Táder  
Avda. Gutiérrez Mellado,  
Molina de Segura, 30500,  
Murcia, España.  
C-e: atserrano@gmail.com

Recibido: 07/03/2016. Aceptado: 26/05/2016.

## EVOLUCIÓN DE LAS CONCENTRACIONES DE LOS COMPONENTES DEL EQUILIBRIO

Con la finalidad de analizar la forma en que evolucionan las concentraciones de los reactivos y productos de una reacción que tiende al estado de equilibrio, centraremos nuestro estudio en un sistema reversible muy simple, de estequiometría 1 : 1, que representaremos como  $A \rightleftharpoons B$ . La elección de este sistema nos facilitará su análisis y la extrapolación de las conclusiones obtenidas a situaciones más complejas.

Llamaremos  $a$  y  $b$  a las respectivas concentraciones iniciales de los componentes A y B,  $x$  al cambio que experimentan las concentraciones de cada componente en un intervalo de tiempo  $t$  dado, y  $x_e$  al valor final de  $x$  cuando se alcanza el equilibrio.

Si además suponemos que tanto el proceso directo ( $A \rightarrow B$ ), como el inverso ( $B \rightarrow A$ ), transcurren en una sola etapa elemental, la velocidad de reacción  $v_i$  de cada uno de estos procesos será directamente proporcional a las respectivas concentraciones de A y B:<sup>[2]</sup>

Proceso	Velocidad
$A \rightarrow B$	$v_1 = k_1 \cdot [A] = k_1 \cdot (a - x)$
$B \rightarrow A$	$v_2 = k_2 \cdot [B] = k_2 \cdot (b + x)$

siendo  $k_1$  y  $k_2$  las correspondientes constantes de velocidad de los procesos directo e inverso, y  $[A]$  y  $[B]$  las concentraciones de reactivos (A) y productos (B) que hay en cada instante.

De acuerdo con esto, la velocidad neta de reacción  $v$  vendrá dada por la ecuación

$$v = \frac{d[B]}{dt} = \frac{dx}{dt} = k_1 \cdot (a - x) - k_2 \cdot (b + x),$$

y como en el equilibrio se cumple que la velocidad neta es nula, se deduce que la relación entre la constante de

equilibrio  $K_c$  y las constantes de velocidad de los procesos directo e inverso viene dada por:

$$\frac{b + x_e}{a - x_e} = \frac{[B]_{eq.}}{[A]_{eq.}} \equiv K_c = \frac{k_1}{k_2}$$

Finalmente, la resolución de la ecuación de la velocidad conduce a:<sup>[3]</sup>

$$x = x_e \cdot \left[ 1 - \frac{1}{e^{(k_1+k_2) \cdot t}} \right]; [A] = a - x; [B] = b + x$$

### ANALOGÍA UTILIZANDO CARTAS

Aunque las ecuaciones anteriores nos dan una descripción cuantitativa de la evolución de un sistema reversible desde un estado inicial de no equilibrio, hasta otro estado final de equilibrio, las dificultades conceptuales y matemáticas que lleva aparejadas este estudio, hacen aconsejable un tratamiento inicial cualitativo, sobre todo, en los niveles no universitarios.<sup>[4,5]</sup>

Por este motivo son numerosos los autores<sup>[6-10]</sup> que han defendido el uso de analogías para facilitar a los estudiantes la comprensión del carácter dinámico del equilibrio químico. En todas ellas se presenta un fenómeno reversible, tal como la transferencia de un fluido (o de cualquier otro material) dentro del sistema que estamos estudiando, de modo que se llega naturalmente a una situación de equilibrio dinámico.

En este artículo tomaremos como punto de partida la simulación propuesta por Bartholow<sup>[11]</sup> que, a su vez, se basa en otras propuestas anteriores similares.<sup>[12]</sup> Se trata de un juego muy simple entre dos jugadores que intercambian monedas o cartas (de una baraja, por ejemplo). Veamos brevemente la forma en que se desarrolla esta simulación.

El juego funciona mejor cuanto mayor sea el número de cartas, por lo que supondremos que se utilizan las 48 cartas de una baraja ordinaria. Inicialmente, las cartas pueden estar repartidas de cualquier modo entre los dos jugadores, pero para comprender mejor cómo se redistribuyen a medida que se desarrolla el juego, vamos a suponer que uno de ellos comienza con la totalidad de las cartas y el otro con ninguna. Esto equivale a unas condiciones iniciales en las que sólo hay reactivos y la concentración de productos es nula, situación que representaremos como:

	A	↔	B
“concentración” inicial	48		0

Si admitimos que este sistema se ajusta a las condiciones fijadas en el apartado anterior, esto es, se trata de una reacción reversible elemental en un recipiente cerrado y a temperatura constante, las velocidades instantáneas de los procesos directo e inverso vendrán dadas, respectivamente, por  $v_1 = k_1 \cdot [A]$  y  $v_2 = k_2 \cdot [B]$ .

Aunque las constantes de velocidad  $k_1$  y  $k_2$  pueden adoptar cualquier valor en una reacción química, está claro que en esta simulación, en la que el número de cartas (moléculas) total no varía en ningún momento, tales coeficientes deben estar comprendidos entre 0 y 1. Así pues,  $k_1$  representa la fracción de moléculas de A que se transforman en B en un intervalo de tiempo dado; análogamente,  $k_2$  representa la fracción de moléculas de B que se transforman en A en ese mismo intervalo.

Estos coeficientes de intercambio ( $k_1$  y  $k_2$ ), que simulan las constantes de velocidad de los procesos directo e inverso, se mantendrán constantes durante todo el juego. Obviamente, si se eligiesen otros valores para  $k_1$  y  $k_2$  ( $0 < k_i < 1$ ), se llegaría a una situación de equilibrio diferente.

Para concretar, vamos a suponer que  $k_1 = 0,50$  y  $k_2 = 0,25$ . Interpretaremos estos resultados diciendo que en cada jugada, el jugador A le pasa la mitad de sus cartas al otro ( $A \rightarrow B$ ) y, simultáneamente, el segundo le pasa la cuarta parte de las suyas al primero ( $B \rightarrow A$ ).

En el resto de jugadas se aplican las mismas reglas; al principio de cada ciclo de juego, ambos jugadores cuentan sus cartas y le pasan al otro el número de cartas que resulte de multiplicar el correspondiente coeficiente  $k_1$  o  $k_2$  por el número de cartas que tiene en ese momento; cuando el número de cartas a intercambiar sea un número fraccionario, se redondea al entero más cercano. Obviamente, el número de cartas con que se inicia un ciclo de juego, coincide con el número de cartas con que se acaba el anterior, tal y como se observa en la Tabla 1 que muestra el desarrollo de varias jugadas consecutivas de esta partida.

Tabla 1. Resultado tras varios ciclos de la simulación.

		A	↔	B
Ciclo 1.º	Inicial	48		0
	Reaccionan	$0,5 \cdot 48 \rightarrow$	↔	$\leftarrow 0,25 \cdot 0$
	Final	$48 - 24 + 0 = 24$		$0 + 24 - 0 = 24$
Ciclo 2.º	Inicial	24		24
	Reaccionan	$0,5 \cdot 24 \rightarrow$	↔	$\leftarrow 0,25 \cdot 25$
	Final	$24 - 12 + 6 = 18$		$24 + 12 - 6 = 30$
Ciclo 3.º	Inicial	18		30
	Reaccionan	$0,5 \cdot 18 \rightarrow$	↔	$\leftarrow 0,25 \cdot 30$
	Final	$18 - 9 + 8 = 17$		$30 + 9 - 8 = 31$
Ciclo 4.º	Inicial	17		31
	Reaccionan	$0,5 \cdot 17 \rightarrow$	↔	$\leftarrow 0,25 \cdot 31$
	Final	$17 - 9 + 8 = 16$		$31 + 9 - 8 = 32$
Ciclo 5.º	Inicial	16		32
	Reaccionan	$8 \rightarrow$	↔	$\leftarrow 8$
	Final	16		32

Estos resultados ponen de manifiesto que, a medida que se completan sucesivos ciclos del juego, el número de cartas de A y de B varía y las velocidades de intercambio se van aproximando entre sí. Transcurrido el suficiente número de ciclos, las velocidades de los procesos directo e inverso se igualarán y las concentraciones de A y B permanecerán constantes, a pesar de que el juego continúa.

Al alcanzarse el equilibrio, el cociente de reacción  $Q$  coincide con el cociente de los coeficientes de intercambio:

$$Q_{\text{equilibrio}} = \frac{[B]_{\text{eq.}}}{[A]_{\text{eq.}}} \equiv K_c \left( = \frac{32}{16} \right) = \frac{k_1}{k_2} \left( = \frac{0,50}{0,25} \right),$$

siendo  $K_c$  la constante de equilibrio expresada en función de concentraciones.

En el ejemplo considerado, se ha partido de unas condiciones en las que el cociente de reacción inicial ( $Q_{\text{inicial}} = 0/48 = 0$ ) es menor que la constante de equilibrio ( $K_c = k_1/k_2 = 2$ ), por lo que la reacción neta ha transcurrido en el sentido en el que  $Q$  aumenta hasta igualarse a  $K_c$ , esto es, la concentración de B ha ido aumentando y la de A disminuyendo. Si la simulación se lleva a cabo en unas condiciones iniciales diferentes, la evolución de las concentraciones es distinta, pero su cociente coincide con  $K_c$  al alcanzarse el estado de equilibrio.

## SIMULACIÓN EMPLEANDO UNA HOJA DE CÁLCULO

Una vez que se ha comprendido la dinámica del juego, resulta evidente que se puede prescindir de las cartas y utilizar una calculadora o, todavía mejor, una hoja de cálculo para llevar a cabo la simulación mediante una serie de aproximaciones sucesivas, similar a la empleada en el juego de las cartas.

Cómo se deduce del análisis anterior, los cálculos a efectuar son muy simples y repetitivos, pero esto es precisamente lo que nos facilita el empleo de una hoja de cálculo,

### 2.- CONDICIONES INICIALES

Introduzca los valores que correspondan en las casillas resaltadas:

Número de moles de la sustancia A:	0,600
Número de moles de la sustancia B:	0,200
Volumen del recipiente (en L):	1,00
Coefficiente $k_1$ ( $0 < k_1 < 1$ ):	0,50
Coefficiente $k_2$ ( $0 < k_2 < 1$ ):	0,25

De acuerdo con los valores de  $k_1$  y  $k_2$ , los valores del cociente de reacción inicial y de la constante de equilibrio serán:

$$Q_{\text{inicial}} = 0,333$$

$$K_c = k_1 / k_2 = 2,000$$

**Figura 1.** Al usar una hoja de cálculo podemos establecer valores cualesquiera para las concentraciones iniciales de los componentes A y B; igualmente, fijaremos los valores de los coeficientes  $k_1$  y  $k_2$ . A partir de estos datos, la hoja calculará el cociente de reacción inicial  $Q_{\text{in}}$  y el valor de la constante de equilibrio  $K_c$

ya que una vez definidas las operaciones a realizar, resulta muy sencillo automatizarlas.

La hoja de cálculo que hemos diseñado permite establecer los valores de los coeficientes  $k_1$  y  $k_2$ , así como las concentraciones iniciales de las sustancias A y B. En la Figura 1 se muestra una captura de pantalla de dicha hoja en la que se aprecian los parámetros que puede modificar el usuario.

Una vez fijadas las condiciones iniciales, el programa calcula automáticamente las velocidades de los procesos directo e inverso y, a partir de ellas, las concentraciones de las sustancias A y B, así como el cociente de reacción en cada una de las etapas sucesivas que integran la simulación (véase la Figura 2). De acuerdo con lo anterior, las concentraciones finales de cada componente en la etapa "n" serán

$$[A]_n = [A]_{n-1} - k_1 \cdot [A]_{n-1} + k_2 \cdot [B]_{n-1}$$

$$[B]_n = [B]_{n-1} + k_1 \cdot [A]_{n-1} - k_2 \cdot [B]_{n-1}$$

siendo  $[A]_{n-1}$  y  $[B]_{n-1}$  las concentraciones finales de los componentes en la etapa anterior.

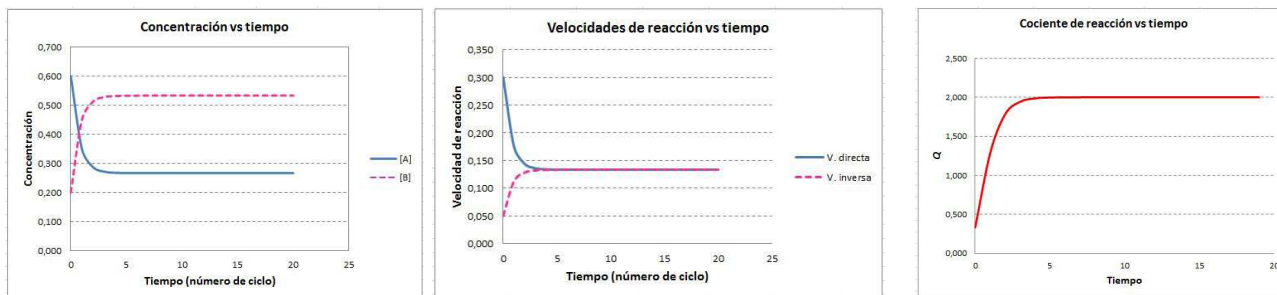
### 3.- ESTABLECIMIENTO DEL EQUILIBRIO

Nº de ciclo	[A]	[B]	$v_1 = k_1 \cdot [A]$	$v_2 = k_2 \cdot [B]$	$Q = [B]/[A]$
0	0,600	0,200	0,300	0,050	0,333
1	0,350	0,450	0,175	0,113	1,286
2	0,288	0,513	0,144	0,128	1,783
3	0,272	0,528	0,136	0,132	1,943
4	0,268	0,532	0,134	0,133	1,985
5	0,267	0,533	0,133	0,133	1,996
6	0,267	0,533	0,133	0,133	1,999
7	0,267	0,533	0,133	0,133	2,000
8	0,267	0,533	0,133	0,133	2,000
9	0,267	0,533	0,133	0,133	2,000
10	0,267	0,533	0,133	0,133	2,000
11	0,267	0,533	0,133	0,133	2,000
12	0,267	0,533	0,133	0,133	2,000
13	0,267	0,533	0,133	0,133	2,000
14	0,267	0,533	0,133	0,133	2,000
15	0,267	0,533	0,133	0,133	2,000
16	0,267	0,533	0,133	0,133	2,000
17	0,267	0,533	0,133	0,133	2,000
18	0,267	0,533	0,133	0,133	2,000
19	0,267	0,533	0,133	0,133	2,000
20	0,267	0,533	0,133	0,133	2,000

**Figura 2.** Captura de pantalla que muestra los cálculos que realiza el programa, a partir de las condiciones iniciales fijadas por el usuario, para las velocidades de reacción directa  $v_1$  e inversa  $v_2$ , las concentraciones de los componentes y el correspondiente cociente de reacción  $Q$ , a medida que se van completando los sucesivos ciclos de la simulación. Obsérvese que al avanzar ésta, las velocidades directa e inversa se van aproximando entre sí y el cociente de reacción tiende hacia el valor de la constante de equilibrio

### VARIACIÓN DE LAS CONCENTRACIONES

Si representamos frente al tiempo (en nuestro caso, el avance de la simulación) los valores obtenidos en cada una de las etapas anteriores, tendremos una idea bastante aproximada de la evolución de las concentraciones de reactivos y productos (v. Fig. 3, izqda.), de las velocidades de reacción de los procesos directo e inverso (Fig. 3, centro.) y del cociente de reacción (Fig. 3 dcha.), a medida que transcurre el proceso.



**Figura 3.** Izqda.: Variación de las concentraciones de reactivos (A) y productos (B) para una reacción en la que el cociente de reacción inicial ( $Q_{ni} = 0,20/0,60 = 0,33$ ) es menor que la constante de equilibrio ( $K_c = k_1/k_2 = 0,50/0,25 = 2,0$ ). La gráfica muestra cómo disminuye la concentración de reactivos hasta alcanzar un valor constante en el equilibrio. Paralelamente, la concentración de productos aumenta y finalmente se mantiene constante. Centro.: Variación de las velocidades de reacción directa e inversa para las condiciones iniciales correspondientes al caso mostrado en la parte izquierda. Derecha: Variación del cociente de reacción al avanzar la reacción anterior hacia el estado de equilibrio

Una de las principales características de la hoja de cálculo es que basta modificar alguno de los datos iniciales para que el programa rehaga automáticamente todos los cálculos<sup>[13,14]</sup> y las gráficas asociadas,<sup>[15]</sup> resultando muy sencillo analizar cómo afectan los cambios introducidos sobre la posición final del equilibrio.

Así, por ejemplo, se pueden modificar las concentraciones iniciales de los componentes y/o el valor de la constante de equilibrio para obtener los diferentes modos de variación de las concentraciones y del cociente de reacción, dependiendo de la relación entre el cociente de reacción inicial y la constante de equilibrio.

### PERTURBACIONES DEL EQUILIBRIO

Con la hoja de cálculo es muy sencillo observar la evolución del sistema cuando se somete a diferentes perturbaciones, tales como la variación de la concentración de algún componente o la modificación de la temperatura.

Para simular una perturbación por variación de la concentración de reactivos o productos, se varía el número de moles de A y/o B una vez que se ha alcanzado el equilibrio. La Figura 4 muestra la respuesta del sistema para una perturbación consistente en aumentar la

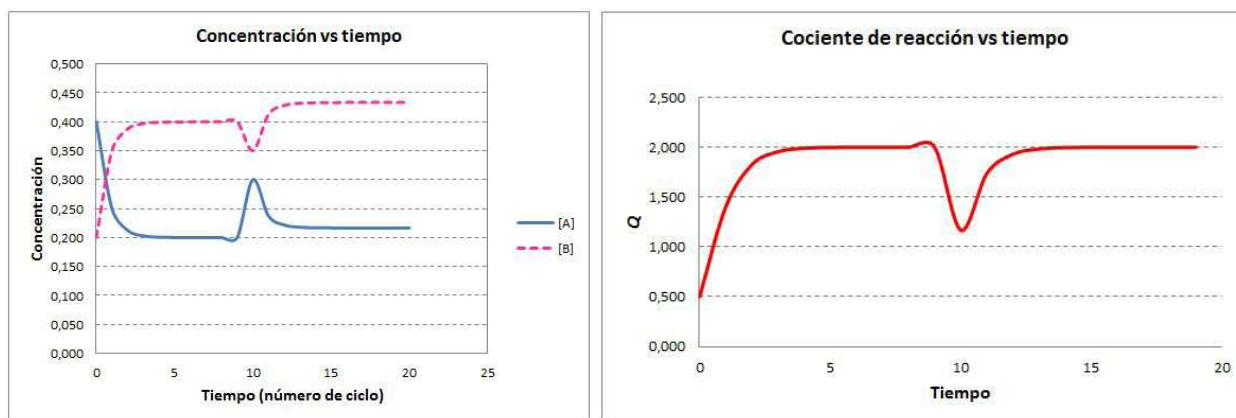
concentración de un componente (A) y disminuir simultáneamente la del otro (B).

Con esta hoja también se puede simular una variación de la temperatura del sistema; una vez que se ha establecido el equilibrio que deseamos perturbar, cuya constante viene dada por  $K_c = k_1/k_2$ , modificamos los valores de los coeficientes iniciales a unos nuevos valores  $k'_1$  y  $k'_2$ , de modo que su cociente corresponda a una constante de equilibrio diferente  $K'_c = k'_1/k'_2$ . En la Figura 5 se observa la variación de las concentraciones y del cociente de reacción cuando se disminuye la constante de equilibrio del sistema.

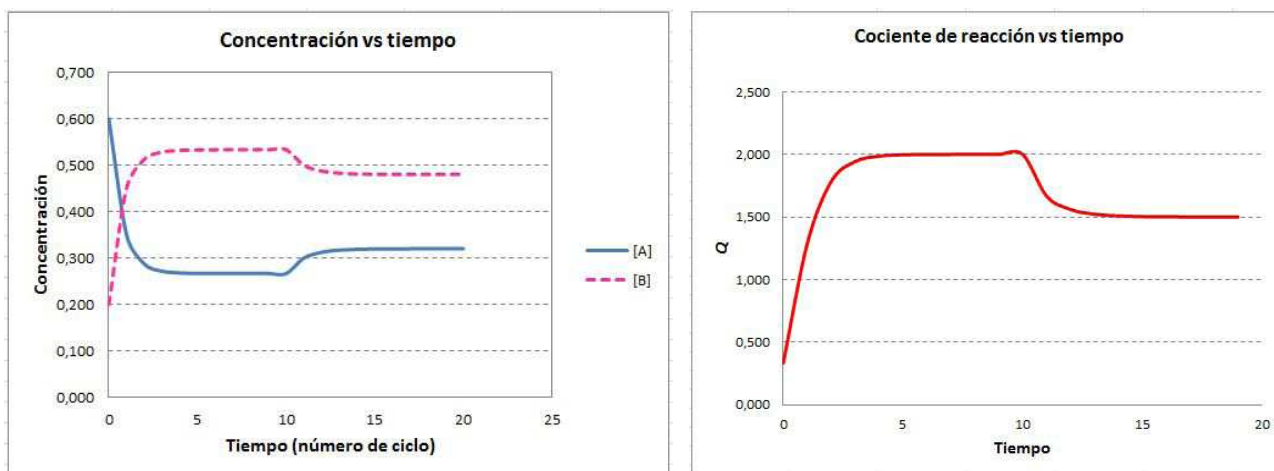
### LIMITACIONES DEL MODELO

Al igual que cualquier otra simulación, nuestra propuesta presenta una serie de limitaciones<sup>[16]</sup> que se pueden resumir en los siguientes puntos.

- El sistema al que se aplica esta simulación, una reacción reversible elemental de estequiometría 1 : 1, corresponde a un caso extremadamente simple, mucho más sencillo que los sistemas ordinarios con los que nos encontramos en el estudio del equili-



**Figura 4.** La gráfica de la izquierda corresponde a una perturbación consistente en disminuir la concentración del componente B y aumentar la del A (en el ciclo número 10); obsérvese que, tras la perturbación, varían las concentraciones hasta alcanzarse una nueva posición de equilibrio. La gráfica de la derecha muestra el efecto de esta perturbación sobre el cociente de reacción y su evolución hasta adquirir el valor que tenía inicialmente, dado que no se ha modificado el valor de la constante de equilibrio



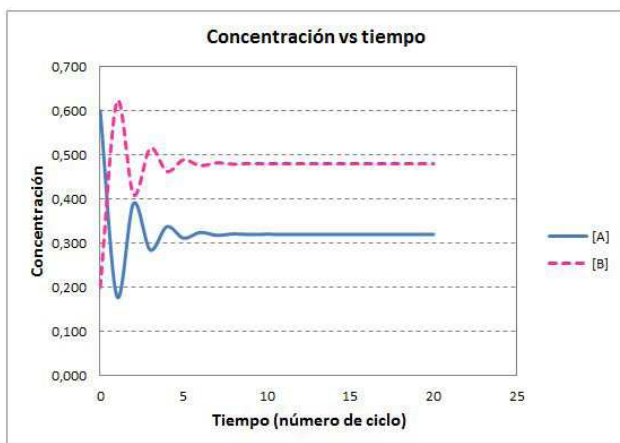
**Figura 5.** Simulación de una perturbación del equilibrio al modificar la temperatura (en el ciclo nº 10, una vez que se ha establecido el equilibrio inicial). La gráfica de la izquierda muestra el efecto de esta perturbación sobre las concentraciones de los componentes; en la gráfica de la derecha se observa la evolución del cociente de reacción desde el valor que presentaba en el equilibrio inicial ( $Q = 2,0$ ) hasta la nueva posición de equilibrio ( $Q = 1,5$ )

brio químico. La relación entre las concentraciones y las constantes de reacción, de las etapas en que se subdivide el mecanismo de reacción, es mucho más compleja en un sistema real.

- Cuánto más pequeños sean los coeficientes  $k_1$  y  $k_2$ , mayor será el número de ciclos necesarios para que se establezca el equilibrio. En la práctica, esto significa que la simulación de la perturbación debe introducirse una vez que el sistema haya alcanzado el equilibrio inicial.
- Tal y como se ha planteado esta simulación, los coeficientes  $k_1$  y  $k_2$  podrían adoptar cualquier valor comprendido entre 0 y 1; no obstante, la aproximación funciona mejor cuando los coeficientes no están muy próximos a 1. Si alguno de los coeficientes estuviese cercano a la unidad, significaría que, en cada ciclo de la simulación, la práctica totalidad de ese componente se transformaría en el otro (situación que no debemos descartar a priori, desde

un punto de vista microscópico). Como muestra la gráfica de la Figura 6, el equilibrio se establece finalmente, pero las concentraciones oscilan, en lugar de variar gradualmente.

- Los valores que empleamos para  $k_1$  y  $k_2$  son totalmente ficticios y carentes de respaldo experimental; simplemente buscamos una pareja de valores de tales coeficientes que estén comprendidos entre 0 y 1 y cuyo cociente determine el valor deseado para la constante de equilibrio. En la práctica es muy difícil conocer los valores reales de  $k_1$  y  $k_2$ , y, todavía más difícil, conocer su dependencia de la temperatura.
- Las gráficas concentración-tiempo, velocidad-tiempo y cociente de reacción-tiempo que proporciona esta simulación hacen uso de una serie de aproximaciones que sustituyen al cálculo diferencial. A pesar de ello, los resultados obtenidos con este método, para los valores de las concentraciones finales de los componentes, coinciden con los obtenidos mediante los cálculos estequiométricos.



**Figura 6.** Si alguno de los coeficientes de intercambio está próximo a 1, las concentraciones oscilan notablemente en los primeros ciclos de la simulación, aunque finalmente se establece el equilibrio

## CONCLUSIONES

Todo lo anterior pone de manifiesto que este modelo de simulación, basado en unas reglas muy simples, no puede reflejar la complejidad que, desde el punto de vista microscópico, presenta un sistema real en equilibrio. Aun así, nos proporciona una descripción cualitativa de la variación de los parámetros macroscópicos que caracterizan el equilibrio químico.

Aunque la simulación planteada se refiere a una estequiometría del tipo  $1 : 1$ , se puede adaptar con relativa facilidad a otras estequiometrías. No obstante, dado que los resultados obtenidos con el supuesto más simple posible ( $1 A \rightleftharpoons 1 B$ ) son extrapolables a casos más complejos,

podemos posponer tales adaptaciones para una fase más avanzada de nuestro estudio.

Con la hoja de cálculo resulta muy sencillo introducir modificaciones en los datos de partida y ver cómo afectan a la posición final del equilibrio. Así, los estudiantes pueden modificar fácilmente los valores de las concentraciones iniciales y/o el valor de la constante de equilibrio para contrastar sus predicciones acerca de la variación de las concentraciones, de las velocidades o del cociente de reacción, con las respuestas que ofrece el programa.

Si estas modificaciones se realizan una vez que ya se ha alcanzado el equilibrio, el programa muestra su repercusión sobre la nueva posición del equilibrio. De este modo, la hoja de cálculo constituye una herramienta muy valiosa para comprender la respuesta de un sistema en equilibrio cuando es sometido a una perturbación.<sup>[17,18]</sup>

Por otra parte, resulta muy instructivo para los estudiantes el que se les proponga diseñar y elaborar su propia hoja de cálculo para llevar a cabo simulaciones similares a ésta, basadas en la idea de que el número de moléculas que reaccionan en cada etapa es directamente proporcional a dicho número. Aunque este proceso puede resultar complejo para los alumnos que no están familiarizados con el empleo de la hoja de cálculo, nuestra experiencia nos muestra que, una vez asimilados los fundamentos básicos de la simulación, no tienen problemas en elaborar su versión de la hoja de cálculo. Y si bien es cierto que sus propuestas no incorporan algunos requisitos formales, cumplen perfectamente el cometido de mostrar la evolución de las concentraciones, de las velocidades de reacción y del cociente de reacción.

Dado que estas herramientas de cálculo se pueden encontrar libremente en Internet, y que no se requieren conocimientos específicos de programación para usarlas, el diseño y elaboración de estas simulaciones está al alcance de los estudiantes del último año de bachillerato.<sup>[19]</sup>

Por todo ello, concluimos que este tipo de simulaciones facilitan el que nuestros alumnos asimilen el concepto de equilibrio químico como un proceso dinámico, sobre todo cuando el sistema es sometido a una perturbación externa y evoluciona espontáneamente hacia una nueva posición de equilibrio.

## BIBLIOGRAFÍA

- [1] R. Petrucci, W. Harwood, *Química general*. Prentice Hall, Madrid, **1999**.
- [2] T. Brow, H. LeMay, B. Bursten, *Química, la ciencia central*. Prentice Hall, México, **1998**.
- [3] I. Levine, *Fisicoquímica*. McGraw Hill, Madrid, **1996**.
- [4] C. Furió, E. Ortiz, *Enseñanza de las Ciencias*, **1983**, 1(1), 15-20.
- [5] J. Quílez, V. San José, *Enseñanza de las Ciencias*, **1995**, 13(1), 72-80.
- [6] *CBA (Sistemas químicos)*. Reverté, Barcelona, **1967**.
- [7] *Chem (Química: una ciencia experimental)*, Reverté, Zaragoza, **1966**.
- [8] Nuffield Foundation, *Química*, Reverté, Barcelona, **1970**.
- [9] J. Quílez, S. Lorente, F. Chorro, E. Enciso, *Química 2º bachillerato*. Ecir, Valencia, **2003**.
- [10] *ACS, Química. Un Proyecto de la American Chemical Society*. Reverté, Barcelona, **2005**.
- [11] M. Bartholow, *Journal of Chemical Education*, **2006**, 83(1), 48A.
- [12] L. Edmonson, L. Lewis, *Journal of Chemical Education*, **1999**, 76(4), 502.
- [13] A. Raviolo, A. Garritz, *Educación Química*, **2007**, 18(1), 16-29.
- [14] A. Raviolo, *Educación Química*, **1999**, 5(3), 20-25.
- [15] A. Raviolo, *Journal of Science Education*, **2003**, 4(1), 44-45.
- [16] A. Raviolo, *Educación Química*, **2006**, 17 (número extraordinario), 300-307.
- [17] A. Raviolo, J. Andrade, *Educación Química*, **1998** 9(1), 40-45.
- [18] J. Quílez, *Educación Química*, **1998**, 9(6), 367-377.
- [19] S. Carson, *School Science Review*, **1997**, 79(287), 69-80.