# Universidad Autónoma Del Estado De Hidalgo

## Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería

Área Académica de Ciencia de la Tierra y Materiales

UAEH

# Uso del software HYDRA-MEDUSA como herramienta para predecir y validar especies químicas: Síntesis y caracterización de precipitados


**Presentado por**

Luz Elena Ibarra Cruz


**Para obtener el título de**

Licenciado en Ingeniería de Materiales


**Director de tesis:**

Dr. Legorreta García Felipe

**Codirector de tesis:**

Dr. Trujillo Villanueva Luis Eduardo

**Primer vocal:**

Dr. Ramírez Cardona Màrius

**Segundo vocal:**

M. en C. Valdez Sierra Jonnatan


Mineral de la Reforma, Hidalgo, marzo 2025.

Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo
Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería
School of Engineering and Basic Sciences

Mineral de la Reforma, Hgo., a 20 de enero de 2025

**Número de control:** ICBI-D/077/2025
**Asunto:** Autorización de impresión.

**MTRA. OJUKY DEL ROCÍO ISLAS MALDONADO**
**DIRECTORA DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR DE LA UAEH**

Con fundamento en lo dispuesto en el Título Tercero, Capítulo I, Artículo 18 Fracción IV; Título Quinto, Capítulo II, Capítulo V, Artículo 51 Fracción IX del Estatuto General de nuestra Institución, por este medio le comunico que el Jurado asignado a la Egresada de la Licenciatura en Ingeniería de Materiales **Luz Elena Ibarra Cruz,** quien presenta el trabajo de titulación **"Uso del software Hydra-Medusa como herramienta para predecir y validar especies químicas: Síntesis y caracterización de precipitados",** después de revisar el trabajo en reunión de Sinodales ha decidido autorizar la impresión del mismo, hechas las correcciones que fueron acordadas.

A continuación, firman de conformidad los integrantes del Jurado:

**Presidente:** Dr. Márius Ramírez Cardona

**Secretario:** Dr. Luis Eduardo Trujillo Villanueva

**Vocal:** Dr. Felipe Legorreta García

**Suplente:** M. en C. Jonnatan Valdez Sierra

Sin otro particular por el momento, reciba un cordial saludo.

Atentamente
"Amor, Orden y Progreso"

Mtro. Gabriel Vergara Rodríguez
Director del ICBI

GVR/YCC

Ciudad del Conocimiento. Carretera Pachuca-Tulancingo Km. 4.5 Colonia Carboneras, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México. C.P. 42184
Teléfono: 771 71 720 00 Ext. 40001
direccion_icbi@uaeh.edu.mx,
vergarar@uaeh.edu.mx

## AGRADECIMIENTOS

Al llegar a la culminación de esta tesis, considero importante expresar mi sincero agradecimiento a quienes han sido faros en este viaje.

A mis padres, por su apoyo inquebrantable, su amor y su guía, que han sido pilares en mi formación y en cada paso que he dado.

A mi familia, tía, hermanos y seres queridos, por su compañía, aliento y confianza en mí, incluso en los momentos más desafiantes.

A la vida, agradezco sus altibajos que han proporcionado lecciones valiosas y oportunidades para crecer. Mi gratitud se extiende al universo por permitirme llegar a esta etapa.

A Dios, independientemente de nuestras interpretaciones, agradezco la fuerza interior encontrada en la fe y la trascendencia, brindando consuelo en momentos de incertidumbre y dando claridad en los momentos de duda.

A mi director de tesis, agradezco su compromiso, orientación y sabiduría. Su papel ha sido muy importante y la inspiración de su guía enriquece este logro.

A mi codirector y al resto de quienes me han brindado apoyo académico y amistad, les agradezco su tiempo y conocimientos. Su ayuda ha sido valiosa.

A mí misma, reconozco el esfuerzo, perseverancia y dedicación depositados en cada página de este manuscrito. La determinación ha sido la brújula que me ha guiado a través de los desafíos académicos.

Que estas palabras sirvan como un recordatorio de que la búsqueda del conocimiento y la realización de los sueños son caminos valiosos. Que cada paso adelante sea una afirmación de nuestra capacidad humana para convertir la visión en realidad y que esta tesis sea un testimonio de la posibilidad de alcanzar metas propuestas.

## DEDICATORIA

Con mucho cariño, dedico esta tesis a mis sobrinos Alicia Cateleyn Ibarra Cano y José Luis Hernández Ibarra. Espero que, cuando puedan leer estas palabras, encuentren en ellas un mensaje de inspiración para crecer con determinación, esfuerzo y disciplina, que cada paso que den en su camino esté guiado por la pasión por aprender y la confianza en su propio potencial.

## RESUMEN

Esta tesis explora el uso de diagramas de equilibrio químico como herramienta para predecir y caracterizar el comportamiento de especies químicas en soluciones acuosas y precipitados. Para ello, se emplea el software HYDRA-MEDUSA, un paquete computacional que permite generar y analizar diagramas de equilibrio en función del pH y la concentración.

El trabajo se enfoca en la construcción de diagramas de equilibrio químico para estudiar la formación de precipitados a partir de nitratos de zinc, aluminio y níquel en medios alcalinos. Se describe detalladamente la metodología para obtener datos experimentales, realizar cálculos de concentración, diseñar experimentos de validación y caracterizar los productos obtenidos mediante diferentes técnicas como difracción de rayos X (DRX) y espectroscopía LIBS.

Los resultados obtenidos permiten evaluar de manera introductoria, la precisión de HYDRA-MEDUSA en la predicción de especies químicas en solución y el efecto del pH en la formación de distintas especies químicas, así como su aplicabilidad en la síntesis de materiales. Este estudio proporciona una herramienta útil para estudiantes, investigadores y profesionales en la optimización de procesos químicos, el diseño de nuevos materiales y la investigación científica.

## INDICE


**1. INTRODUCCIÓN ..... 12**

**2. ANTECEDENTES ..... 14**

**3. OBJETIVOS DE INVESTIGACIÓN ..... 17**
**Objetivo General ..... 17**
**Objetivos Específicos ..... 17**

**4. JUSTIFICACIÓN ..... 19**

**MARCO TEÓRICO ..... 20**

**1. CONCEPTOS BÁSICOS DE QUÍMICA ..... 21**
**1.1 Átomo ..... 21**
***Protones ..... 22***
***Neutrones ..... 22***
***Electrones ..... 22***
**1.2 Elementos Químicos ..... 22**
**1.3 Tabla Periódica ..... 23**
***Grupos o Familias ..... 23***
***Períodos ..... 23***
***Números Atómicos ..... 23***
***Propiedades Químicas y Físicas ..... 23***
***Bloques ..... 24***
**1.4 Moléculas ..... 24**
**1.5 Compuestos ..... 24**
**1.6 Electrones de Valencia ..... 25**
**1.7 Regla del Octeto ..... 25**
**1.8 Tipos de enlaces químicos ..... 26**
**1.9 Reacciones químicas ..... 27**
**1.10 Ecuaciones químicas ..... 27**
**1.11 Estequiometría ..... 28**
**1.12 Uso de fórmulas químicas y coeficientes estequiométricos. ..... 28**
**1.13 Nomenclatura de compuestos químicos. ..... 30**
**1.14 Definición de solución, solvente, soluto y suspensión ..... 31**
***Solución ..... 31***
***Solvente ..... 31***
***Solutos ..... 32***
***Suspensión ..... 32***
**1.15 Disolución de sales, ácidos y bases comunes en agua ..... 32**

*Ejemplos de Sales Comunes* ..... *33*
**1.16 Moles y masa molar** ..... **35**
*Mol* ..... *35*
*Masa molar* ..... *35*
**1.17 Medidas de concentración: Molaridad, molalidad, fracción molar y porcentaje en masa** ..... **36**
*Molaridad* ..... *36*
*Molalidad* ..... *36*
*Fracción molar* ..... *37*
*Porcentaje en Masa (%)* ..... *37*
**1.18 Efecto de la concentración en las reacciones químicas.** ..... **37**

**2. FUNDAMENTOS DE LA TERMODINÁMICA** ..... **38**
**2.1 Energía** ..... **39**
**2.2 Entalpía** ..... **39**
**2.3 Entropía** ..... **40**
**2.4 Energía Libre de Gibbs** ..... **40**
**2.5 Primera Ley de la Termodinámica (Ley de la conservación de la energía)** ..... **41**
**2.6 Segunda Ley de la Termodinámica (Ley de la Entropía)** ..... **42**
**2.7 Entalpía de reacción** ..... **42**
*Entalpía de reacción endotérmica* ..... *42*
*Entalpía de reacción exotérmica* ..... *42*

**3. CONSTANTE DE EQUILIBRIO Y EQUILIBRIO QUÍMICO** ..... **43**
**3.1 Ley de acción de masas y constante de equilibrio** ..... **44**
**3.2 La importancia de la temperatura y la presión en los equilibrios químicos** ..... **46**
*Temperatura en el equilibrio químico* ..... *46*
*Presión en el equilibrio químico* ..... *46*

**4. EQUILIBRIO EN SISTEMAS ACUOSOS** ..... **47**
**4.1 Equilibrio Ácido-Base** ..... **47**
**4.2 Conceptos de pH y pOH:** ..... **48**
**4.3 Hidrólisis** ..... **48**
**4.4 Precipitados** ..... **49**
*Factores que afectan la precipitación* ..... *50*

**5. FISICOQUÍMICA BÁSICA** ..... **50**
**5.1 Cinética Química** ..... **51**
**5.2 Equilibrio Dinámico** ..... **51**
**5.3 Influencia de la temperatura, presión y concentración en las reacciones químicas.** ..... **52**
*Temperatura en las reacciones químicas* ..... *52*
*Presión en las reacciones químicas* ..... *52*
*Concentración en las reacciones químicas* ..... *53*

**6. FUNDAMENTOS DE LOS DIAGRAMAS DE EQUILIBRIO QUÍMICO ..... 53**
**6.1 Tipos de diagramas de equilibrio químico ..... 54**
*Diagramas de equilibrio binarios ..... 54*
*Diagramas de equilibrio ternarios ..... 54*
*Diagramas de equilibrio cuaternarios ..... 54*
*Diagramas de equilibrio de fase líquida-vapor ..... 55*
*Diagramas de equilibrio de fase sólida-líquida ..... 55*
*Diagramas de equilibrio de fase sólida-sólida ..... 55*
*Diagramas de equilibrio de fase líquida-líquida ..... 55*
*Diagramas de equilibrio de fase sólida-gas ..... 55*
**6.2 Conceptos clave de un diagrama de equilibrio químico ..... 56**
*Ejes de coordenadas ..... 56*
*Línea de Equilibrio ..... 56*
*Constante de Equilibrio (K) ..... 56*
*Principio de Le Chatelier ..... 56*
*Equilibrio homogéneo y heterogéneo ..... 57*
**6.3 Diagramas de equilibrio químico: Soluciones y precipitados ..... 57**
**6.4 Aplicaciones generales de los Diagramas de Equilibrio Químico ..... 58**
**6.5 Efecto de la Temperatura en el Equilibrio Químico ..... 58**
*Reacciones Endotérmicas ..... 59*
*Reacciones Exotérmicas ..... 59*

**7. GENERACIÓN DE DIAGRAMAS DE EQUILIBRIO: PH VS FRACCIÓN DE ESPECIE FORMADA ..... 60**
**7.1 Descripción de cómo se construyen los diagramas de equilibrio: pH vs fracción de especie formada. ..... 61**
**7.2 Cálculo de fracciones de especies químicas en función del pH y la concentración ..... 62**

**8. DIAGRAMAS DE EQUILIBRIO QUÍMICO: SOFTWARE HYDRA-MEDUSA ..... 64**
**8.1 Descripción del software HYDRA-MEDUSA ..... 64**
**8.2 Instalación y configuración básica del software HYDRA-MEDUSA ..... 65**
**8.3 Guía inicial para la generación de diagramas de equilibrio químico software HYDRA-MEDUSA ..... 65**

**9. INTERPRETACIÓN GENERAL DE LOS DIAGRAMAS DE EQUILIBRIO QUÍMICOS: SOFTWARE HYDRA-MEDUSA ..... 70**
**9.1 Consideraciones generales para la interpretación ..... 70**
**9.2 Diagramas de predominancia de área (Predominance Area) ..... 71**
**9.3 Diagramas de pH – Fracción (Fraction) ..... 71**
**9.4 Diagramas de Logaritmo–pH (Logarithmic) ..... 72**
*Ejes del diagrama logarítmico ..... 72*
*Curvas en el diagrama logarítmico ..... 73*
**9.5 Interpretación de reacciones químicas ..... 73**

**10. IDENTIFICACIÓN DE FASES Y COMPOSICIONES EN EL EQUILIBRIO ..... 74**
**10.1 Herramientas y técnicas para la interpretación eficiente ..... 74**

**10.2 Errores comunes en la interpretación de diagramas químicos ..... 75**

**METODOLOGÍA ..... 78**

**1. SELECCIÓN DEL SISTEMA QUÍMICO A ESTUDIAR ..... 79**

**2. CASO NITRATO DE ZINC HEXAHIDRATADO $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ ..... 79**

**2.1 Fase inicial de la generación de diagramas de equilibrio caso nitrato de zinc ..... 79**

**2.2 Determinación de la concentración de cada ion (molaridad) caso nitrato de zinc ..... 84**

**2.3 Segunda etapa en la generación de diagramas de equilibrio caso nitrato de zinc ..... 86**

**2.4 Efecto del pH alcalino en el nitrato de zinc en solución ..... 93**

***Nitrato de zinc + hidróxido de sodio ..... 93***

**2.5 Preparación de soluciones para la precipitación de óxido de zinc ..... 105**

***Preparación de la solución de nitrato de zinc ..... 105***

***Preparación de la solución de hidróxido de sodio (NaOH). ..... 106***

**3. CASO NITRATO DE NIQUEL (II) HEXAHIDRATADO $N_2(NiO_3)_2 \cdot 6\ H_2O$ ..... 108**

**3.1 Generación de diagramas de equilibrio para la experimentación con nitrato de níquel II 108**

***Concentración de cada ion (molaridad) caso nitrato de níquel II ..... 108***

***Generación de diagramas de equilibrio caso nitrato de níquel II ..... 108***

**3.2 Efecto del pH alcalino en el nitrato de níquel II en solución ..... 110**

**3.3 Preparación de soluciones para la precipitación de hidróxido de níquel II ..... 112**

***Preparación de la solución de nitrato de níquel (II) ..... 112***

***Adición de hidróxido de sodio y precipitación del hidróxido de níquel (II) ..... 113***

**4. CASO NITRATO DE ALUMINIO NONAHIDRATADO $Al(NO_3)_3 \cdot 9\ H_2O$ ..... 114**

**4.1 Generación de diagramas de equilibrio para la experimentación con nitrato de aluminio 114**

***Concentración de cada ion (molaridad) caso nitrato de aluminio ..... 114***

***Generación de diagramas de equilibrio caso Nitrato de Aluminio ..... 114***

**4.2 Efecto del pH alcalino en el nitrato de aluminio en solución ..... 117**

**4.3 Preparación de soluciones para la precipitación de hidróxido de aluminio ..... 120**

***Preparación de la Solución de nitrato de aluminio ..... 120***

***Adición de Hidróxido de Sodio y Precipitación del Hidróxido de Aluminio ..... 120***

**Resultados y discusión ..... 122**

**1. CASO NITRATO DE ZINC HEXAHIDRATADO $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ ..... 123**

**1.1 Discusión de los diagramas de equilibrio caso nitrato de zinc ..... 123**

***Diagrama equilibrio químico tipo logarítmico ..... 123***

***Especies presentes en el diagrama logarítmico del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$ ..... 124***

***Interpretación del diagrama logarítmico del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$ ..... 125***

***Diagrama equilibrio químico tipo Fracción ..... 126***

**1.2 Efecto del pH alcalino en el nitrato de zinc en solución ..... 129**

**1.3 Obtención de ZnO en el laboratorio ..... 132**

**1.4 Caracterización de precipitados de ZnO ..... 133**

***Propiedades físicas (ZnO) ..... 133***
***Análisis cristalográfico (ZnO) ..... 133***
***Análisis químico mediante Espectroscopía de descomposición inducida por láser. ..... 134***

**2. CASO NITRATO DE NIQUEL II HEXAHIDRATADO $N_2NiO_6 \cdot 6\ H_2O$ ..... 137**

***2.1 Discusión de los diagramas de equilibrio caso nitrato de níquel II ..... 137***

***Diagrama equilibrio químico tipo logarítmico ..... 137***
***Especies presentes en el diagrama tipo logarítmico del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$ ..... 138***
***Interpretación del diagrama logarítmico del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$ ..... 138***
***Diagrama equilibrio químico tipo Fracción ..... 139***

**2.2 Efecto del pH alcalino en el nitrato de níquel II en solución ..... 141**

**2.3 Obtención de $Ni(OH)_2$ en el laboratorio ..... 144**

**2.4 Caracterización de precipitados de $Ni(OH)_2$ ..... 144**

***Propiedades físicas $Ni(OH)_2$ ..... 145***
***Análisis cristalográfico $Ni(OH)_2$ ..... 145***
***Espectroscopia de descomposición inducida por láser $Ni(OH)_2$ ..... 146***

**3. CASO NITRATO DE ALUMINIO NONAHIDRATADO $Al(NO_3)_3 \cdot 9\ H_2O$ ..... 148**

**3.1 Discusión de los diagramas de equilibrio caso nitrato de aluminio ..... 148**

***Diagrama equilibrio químico tipo logarítmico ..... 148***
***Especies presentes en el diagrama logarítmico del sistema $Al^{3+}/NO_3^-$ ..... 149***
***Interpretación del diagrama logarítmico del sistema $Al^{3+}/NO_3^-$ ..... 149***
***Diagrama equilibrio químico tipo Fracción ..... 150***

**3.2 Efecto del pH alcalino en el nitrato de aluminio en solución ..... 152**

**3.3 Obtención de $Al(OH)_3$ en el laboratorio ..... 155**

**3.4 Caracterización de precipitados de $Al(OH)_3$ ..... 156**

***Propiedades físicas $Al(OH)_3$ ..... 156***
***Análisis cristalográfico $Al(OH)_3$ ..... 156***
***Espectroscopía de descomposición inducida por láser $Al(OH)_3$ ..... 157***

**CONCLUSIONES ..... 159**

**1. CONCLUSIONES ..... 160**

# ÍNDICE DE TABLAS

*Tabla 1 Desglose de pesos y porcentajes moleculares del nitrato de zinc hexahidratado*.....84
*Tabla 2 Desglose de las masas elementales del nitrato de zinc hexahidratado.*.....85
*Tabla 3 Cálculo de la molaridad elemental del nitrato de zinc hexahidratado.*.....85
*Tabla 4 Desglose de las masas elementales del nitrato de níquel hexahidratado*.....108
*Tabla 5 Desglose de las masas elementales del nitrato de aluminio nonahidratado*.....114
*Tabla 6 Análisis químico por LIBS del precipitado obtenido de ZnO.*.....135
*Tabla 7 Análisis químico obtenido por LIBS del precipitado obtenido ($Ni(OH)2$)*.....147
*Tabla 8 Análisis químico obtenido por LIBS del precipitado obtenido $Al(OH)_3$.*.....158

# ÍNDICE DE FIGURAS

*Fig. 1 Diagrama de especiación tipo logarítmico, pH vs Fracción, del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$, a concentraciones idénticas de 0.05044M de Zn+ y NO3-.*.....124
*Fig. 2 Diagrama de especiación tipo Fracción, pH vs Fracción, del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$, a concentraciones idénticas de 0.05044 M de $Zn^{2+}$ y $NO_3^-$.*.....127
*Fig. 3 Diagrama de especiación del tipo predominance area, pH vs Fracción, del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$/ $Na^+$.*.....130
*Fig. 4 Diagrama de especiación del tipo Fracción, pH vs Fracción del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$/ $Na^+$, a una concentración 1M de NaOH y a concentraciones idénticas de 0.05044M de $Zn^{2+}$ y $NO_3^-$.*.....131
*Fig. 5 Difractograma de rayos X del precipitado obtenido en la sección 2.5 de la Metodología. Se identifican picos correspondientes a la fase cristalina de óxido de zinc (ZnO).*.....134
*Fig. 6 Imagen del análisis químico obtenido por LIBS indicando 25 puntos de medición del precipitado de ZnO*.....136
*Fig. 7 Diagrama de especiación tipo logarítmico, pH vs Fracción, del sistema $Ni^{2+}$ / $NO_3^-$, a concentraciones idénticas de 0.0447 M de $Ni^{2+}$ y $NO_3^-$.*.....137
*Fig. 8 Diagrama de especiación tipo Fracción, pH vs Fracción del sistema $Ni^{2+}$ / $NO_3^-$, a concentraciones idénticas de 0.0447 M de $Ni^{2+}$ y $NO_3^-$.*.....140
*Fig. 9 Diagrama de especiación del tipo Predominance area (Área de predominancia), pH vs Fracción, del sistema $Ni^{2+}$ / $NO_3^-$/ $Na^+$.*.....142
*Fig. 10 Diagrama de especiación del tipo Fracción, pH vs Fracción, del sistema $Ni^{2+}$ / $NO_3^-$/ $Na^+$, a una concentración 1M de NaOH y a concentraciones idénticas de de 0.0447 M de $Ni^{2+}$ y $NO_3^-$.*.....143
*Fig. 11 Difractograma de rayos X del precipitado obtenido en la sección 3.3 de la Metodología. Se identifican picos correspondientes a las fases de teofrastita ($H_2NiO_2$) e hidróxido de níquel ($Ni(OH)_2$).*.....146
*Fig. 12 Imagen del análisis químico obtenido por LIBS indicando nueve puntos de medición del precipitado ($Ni(OH)_2$).*.....147
*Fig. 13 Diagrama de especiación tipo logarítmico, pH vs Fracción, del sistema $Al^{3+}$/ $NO_3^-$, a concentraciones idénticas de 0.0666 M de $Al^{3+}$ y $NO_3^-$.*.....148
*Fig. 14 Diagrama de especiación tipo Fracción, pH vs Fracción, del sistema $Al^{3+}$/ $NO_3^-$, a concentraciones idénticas de 0.0666 M de $Al^{3+}$/ $NO_3^-$.*.....151
*Fig. 15 Diagrama de especiación del tipo predominance area, pH vs el Log de la concentración, del sistema $Al^{3+}$/$NO_3^-$/$Na^+$.*.....153
*Fig. 16 Diagrama de especiación del tipo Fracción, pH vs Fracción del sistema $Al^{3+}$/$NO_3^-$/$Na^+$, a una concentración 1M de NaOH y a concentraciones idénticas de 0.0666M de $Al^{3+}$/y $NO_3^-$.*.....155
*Fig. 17 Difractograma de rayos X del precipitado obtenido en la sección 4.3 de la Metodología. Se identifican picos correspondientes a las fases de Bayerita, Doyleíta y Gibbsita.*.....157
*Fig. 18 Imagen del análisis químico obtenido por LIBS indicando nueve puntos de medición del precipitado de $Al(OH)_3$.*.158

# 1. INTRODUCCIÓN

La química, en su constante búsqueda por comprender y manipular la materia, se apoya en herramientas tanto teóricas como prácticas. Entre estas herramientas, los diagramas de equilibrio químico se destacan como una alternativa para entender los confusos procesos que gobiernan. Estos diagramas, fundamentales para predecir el comportamiento de los compuestos en diversas condiciones, son la piedra angular de numerosos campos de la química, desde la síntesis de nuevos materiales hasta la comprensión de fenómenos bioquímicos.

En el marco de esta búsqueda por comprender los equilibrios químicos, la tecnología ha jugado un papel fundamental al proporcionar herramientas computacionales cada vez más avanzadas. Una de estas herramientas es el software HYDRA-MEDUSA, diseñado específicamente para la generación y análisis de sistemas químicos a temperatura ambiente. Ignasi Puigdomenech es el autor del programa utilizado para el análisis y la representación de sistemas químicos. Este software se divide en dos componentes principales: Hydra, que incluye una base de datos de constantes de equilibrio logK a 25°C. A través de Hydra, los usuarios pueden definir el sistema químico de interés, especificando las especies y las condiciones del sistema. Por otro lado, el componente Medusa, se encarga de generar diferentes tipos de diagramas útiles en la visualización de los resultados. Esta herramienta facilita la interpretación gráfica de los equilibrios químicos en diferentes condiciones. Ambas partes del software funcionan conjuntamente para ofrecer una solución completa en el análisis y visualización de sistemas químicos.

Esta tesis estudia la importancia de los diagramas de equilibrio químico y explora cómo el software HYDRA-MEDUSA puede ser una herramienta idónea en este proceso. Se generan diagramas de equilibrio químico, para comprender cómo estos pueden utilizarse para predecir el comportamiento de los compuestos en diferentes condiciones de pH. De igual manera, los diagramas de equilibrio químico fueron validados de manera experimental.

Han sido seleccionados diferentes nitratos como compuestos modelo en la experimentación debido a su versatilidad y relevancia en numerosos campos de la química. Al reaccionar con ácidos y/o bases, estos compuestos exhiben una variedad de comportamientos, desde la formación de

iones hasta la precipitación de sólidos, lo que los convierte en candidatos ideales para estudiar los equilibrios químicos.

A lo largo de esta investigación se abordarán varios aspectos clave, se explicará en detalle cómo se construyen los diagramas de equilibrio químico utilizando el software HYDRA-MEDUSA, desde la recopilación de datos hasta la interpretación de los resultados. Esto incluirá una descripción paso a paso de los cálculos necesarios para ingresar la información requerida por el software, como lo es la molaridad de las soluciones y el pH. Además, se analizará la utilidad práctica de estos diagramas, demostrando cómo pueden ser utilizados para predecir y comprender el comportamiento de las reacciones químicas en diferentes condiciones, con distintos precursores.

Este trabajo no solo tiene implicaciones teóricas, sino que también tiene importantes implicaciones prácticas, ya que puede ayudar a evitar experimentaciones fallidas y optimizar el diseño de experimentos químicos. En esta tesis se proporcionará una visión general de los conceptos fundamentales necesarios para comprender y analizar los diagramas de equilibrio químicos, desde los principios básicos de la química, la fisicoquímica y la termodinámica, esto permitirá a los lectores familiarizarse con los fundamentos teóricos subyacentes que sustentan el estudio de los equilibrios químicos y su aplicación en la práctica.

En recapitulación, esta tesis representa un esfuerzo integral para explorar y aprovechar el potencial de los diagramas de equilibrio químico y el software HYDRA-MEDUSA en el estudio de sistemas químicos a temperatura ambiente. Al comprender cómo se construyen y utilizan estos diagramas, se espera proporcionar una herramienta invaluable para la comprensión y el diseño de procesos químicos en diversos contextos.

# 2. ANTECEDENTES

El programa HYDRA-MEDUSA, desarrollado por Ignasi Puigdomenech, es utilizado para calcular equilibrios químicos en soluciones acuosas y generar diagramas de predominancia y especies químicas. Este programa es útil para optimizar y aplicar procesos químicos, como la síntesis de materiales avanzados, dispositivos ópticos, celdas solares, el reciclaje de residuos metálicos y la producción de cerámicos, al ayudar a visualizar las condiciones óptimas para la formación de especies deseadas y prevenir compuestos no deseados. Su uso permite mejorar la eficiencia y precisión en investigaciones químicas complejas.

Recientemente fue publicado por Ibarra-Cruz y colaboradores, la investigación de la obtención de hidróxido de aluminio a partir de chatarra de latas de aluminio mediante el proceso de lixiviación en solución alcalina. Los resultados demostraron que los diagramas de equilibrio químico, elaborados con el software HYDRA-MEDUSA, son útiles para explicar la formación de diferentes especies químicas durante este proceso. Los diagramas indicaron la conversión de metales de aleación en especies sólidas a pH 14, separables por filtración y la precipitación de $Al(OH)_{3(s)}$ al modificar el pH a 7. Los resultados experimentales coinciden con la simulación obtenida por el software HYDRA-MEDUSA, obteniendo la formación de precipitados sólidos, especies iónicas/acuosas e impurezas encontradas en los análisis químicos del producto final *(Ibarra-Cruz, 2024).*

En otro estudio sobre la síntesis de di tiourea cloruro de cadmio, se utilizó el software HYDRA-MEDUSA para analizar los efectos del pH en la reacción química. Se observó que un pH ácido favorece la formación del complejo, mientras que un pH básico, a las mismas concentraciones, se promueve la formación de otros compuestos como sulfuro de cadmio. Los análisis de DRX mostraron una estructura más cristalina a pH ácido y una menor cristalinidad a pH básico. Este estudio demuestra la importancia del control del pH en la síntesis de compuestos inorgánicos y sus potenciales aplicaciones en campos como dispositivos ópticos y celdas solares *(L. E. Trujillo (2018).*

En un estudio se preparó perovskita $La_{0.75}\ Sr_{0.25}\ Co_{0.5}\ Fe_{0.5}\ O_3$ mediante una ruta de química húmeda, utilizando la polimerización con ácido cítrico y propiónico. Los diagramas de equilibrio

indicaron la prevalencia de ciertas especies en rangos específicos de pH, destacando la importancia del control de este parámetro en la dinámica de los procesos. Las especies predominantes variaron según el pH, influenciando la formación de sustancias insolubles o no deseadas. Este estudio demuestra la relevancia del pH en la síntesis de materiales inorgánicos y su potencial impacto en aplicaciones como membranas de purificación de oxígeno y celdas de combustible de óxido sólido *(Jairo, 2009).*

En otro estudio sobre la dermatitis alérgica de contacto a metales, Nikpour empleó diagramas de equilibrio químico generados en el software HYDRA-MEDUSA para evaluar el cambio de pH del agua en presencia de iones de aluminio y cromo. Los resultados destacaron la influencia significativa del pH y la composición del sudor en la bioaccesibilidad de aluminio y cromo, lo que resalta la importancia de estos parámetros en la síntesis de materiales y en pruebas diagnósticas de alergia. Los resultados sugieren una baja fracción bioaccesible de aluminio en diversas condiciones, lo que podría explicar la baja tasa de reacciones positivas en pacientes alérgicos. Además, se observaron diferencias considerables en la bioaccesibilidad de aluminio y cromo según la sal y el pH, lo que subraya la complejidad de estos procesos y la necesidad de un análisis detallado mediante modelado de especiación química *(Nikpour,2021).*

En el estudio de los sedimentos del río Ganges se destacó la importancia de analizar las fracciones geoquímicas de metales pesados mediante el software de equilibrio químico HYDRA-MEDUSA. Este estudio reveló la presencia de diferentes especies de metales en función del pH, lo que resalta la relevancia de considerar el equilibrio químico en la evaluación de la contaminación y los riesgos asociados en los ecosistemas acuáticos *(Pandey, 2014).*

En 2013, Serrano López y colaboradores, utilizaron el software HYDRA-MEDUSA para investigar la presencia de diferentes formas de iridio en un rango de pH de 0 a 2 y un potencial entre 0.83 y 0.84 V vs SHE. Los diagramas de equilibrio generados les permitieron identificar las especies de iridio predominantes bajo estas condiciones específicas. Utilizaron esta información para diseñar experimentos enfocados en determinar el pH óptimo necesario para lograr la disolución requerida del iridio. Gracias a estos diagramas, los autores lograron ajustar de manera precisa los parámetros experimentales, mejorando la eficiencia y precisión en la manipulación del iridio en soluciones ácidas y controladas *(Serrano-López,2015).*

En otro estudio, de separación de zinc y cobre de una mezcla de cenizas de latón mediante un proceso de lixiviación selectiva y extracción con solventes. Se utilizó el software HYDRA-MEDUSA para elaborar diagramas de especiación y comprender mejor las reacciones en el sistema. Los resultados muestran que la extracción selectiva de zinc sobre cobre se logró eficazmente con D2EHPA como agente extractor. Además, se destacó la importancia del pH y el potencial redox en la eficiencia del proceso de extracción. Esta investigación destaca la utilidad de los diagramas de equilibrio químico en el software HYDRA-MEDUSA para diseñar y optimizar procesos de separación de metales *(Mont, 2020).*

El software HYDRA-MEDUSA también fue utilizado en una publicación sobre el crecimiento directo de recubrimientos de hidróxidos dobles en capas, por sus siglas en inglés (LDH) Layer Double Hidroxyde, en aleaciones de magnesio. En esta investigación, se emplearon simulaciones termodinámicas para evaluar los equilibrios químicos, con el objetivo de comprender mejor los procesos de formación de LDH en la superficie de la aleación AZ91. Los resultados obtenidos permitieron identificar las condiciones óptimas para la formación de recubrimientos LDH, mejorando la resistencia a la corrosión de las aleaciones de magnesio. Esto demostró la utilidad de HYDRA-MEDUSA en el diseño y optimización de materiales avanzados mediante el control preciso de los parámetros químicos y ambientales *(Shulha, 2018).*

Agata y colaboradores, elaboraron diagramas de equilibrio químico de especies de metales, como Cs(I) y Am(III) adsorbidos en bentonitas en soluciones acuosas. Los diagramas proporcionaron una comprensión determinante de los procesos de adsorción de radionúclidos, específicamente de los valores de pH y de concentración para la adsorción de las bentonitas de las comunidades de Wyoming y Karakaya. Los resultados indican que ambas bentonitas son efectivas para la eliminación de iones de radionúclidos de soluciones acuosas, lo que sugiere su potencial aplicación en el tratamiento de efluentes radiactivos *(Agata, 2021).*

Por lo anterior, es evidente que los diagramas de equilibrio generados por HYDRA-MEDUSA son un excelente complemento para optimizar procesos químicos complejos, como la síntesis de materiales avanzados y el reciclaje de residuos. Estos estudios, junto con investigaciones en campos como la bioaccesibilidad de metales y la protección ambiental, demuestran la versatilidad de HYDRA-MEDUSA en diversas aplicaciones químicas en laboratorio e industriales.

# 3. OBJETIVOS DE INVESTIGACIÓN

## Objetivo General

El objetivo es desarrollar un trabajo teórico-práctico que pueda ser utilizado como una guía que permita la elaboración y utilización de diagramas de equilibrio químico pH vs fracción de especie formada, con el fin de predecir y caracterizar las especies químicas en soluciones acuosas y precipitados, lo que permitirá determinar las condiciones adecuadas de pH y concentración para identificar dichas especies y aprovecharlas en diversas aplicaciones tanto industriales como en la investigación, validando finalmente las predicciones mediante experimentos prácticos.

## Objetivos Específicos

1. Establecer una metodología para la obtención de los datos experimentales mediante técnicas analíticas precisas, asegurando la exactitud y confiabilidad de los resultados teóricos obtenidos, asegurando la reproducibilidad de los experimentos.
2. Realizar cálculos que permitan obtener las concentraciones para el uso de los programas Hydra y Medusa utilizando fórmulas químicas y parámetros de entrada específicos, para simular de manera precisa los equilibrios químicos en diferentes sistemas y prever las especies químicas formadas en diversas condiciones experimentales.
3. Diseñar experimentos que permitan verificar y validar las predicciones realizadas mediante los diagramas de equilibrio, midiendo las especies resultantes con el fin de contrastar los resultados experimentales con las especies químicas previstas en diferentes condiciones de pH y concentración.
4. Evaluar y comparar las predicciones obtenidas a través de los resultados experimentales mediante técnicas de caracterización como difracción de rayos X y espectroscopía LIBS, para demostrar la efectividad de los diagramas de equilibrio químico en la predicción y caracterización de especies en soluciones acuosas y precipitados.
5. Desarrollar un trabajo detallado que explique paso a paso el uso de los diagramas de equilibrio químico pH vs fracción de especies formadas en solución mediante la

integración de ejemplos prácticos y casos de estudio reales, para facilitar la comprensión y aplicación del software en investigaciones químicas complejas.

6. Sintetizar óxido de zinc (ZnO), hidróxido de aluminio ($Al(OH)_3$) e hidróxido de níquel ($Ni(OH)_2$) a partir de sus respectivos nitratos utilizando una solución alcalina de NaOH, para estudiar los procesos de precipitación, identificar las condiciones óptimas para la formación de dichos compuestos y validar las predicciones obtenidas con diferentes técnicas de caracterización como difracción de rayos X y análisis químico elemental.

# 4. JUSTIFICACIÓN

En el campo de la química, la comprensión y caracterización de las especies químicas presentes en soluciones acuosas y precipitados son aspectos fundamentales que afectan directamente a una amplia gama de aplicaciones industriales y de investigación. La capacidad de predecir y controlar estas especies químicas es importante para optimizar procesos químicos, diseñar nuevos materiales, sustituir materias primas, proponer disolventes, entender fenómenos biológicos y comprender reacciones que suceden en nuestra vida cotidiana, entre otros. Los diagramas de equilibrio químico son herramientas valiosas que permiten visualizar y analizar la distribución de las especies químicas en función del pH y la concentración de los componentes de una solución. Sin embargo, su correcta utilización y aplicación requiere de un conocimiento profundo de los principios subyacentes y de una metodología rigurosa. Por lo tanto, la elaboración de un trabajo teórico práctico en la utilización de estos diagramas representa una contribución significativa al campo de la metodología en la síntesis de materiales. Este trabajo, proporcionará una herramienta práctica y accesible para estudiantes, investigadores y profesionales, permitiéndoles determinar y predecir de manera eficiente las condiciones de pH y concentraciones óptimas para identificar y caracterizar especies químicas en soluciones acuosas y precipitados. Además, la validación experimental de las predicciones realizadas mediante los diagramas de equilibrio garantizará la fiabilidad y precisión de este enfoque. Los experimentos diseñados en este estudio proporcionarán una base empírica sólida para evaluar la eficacia del trabajo desarrollado y para identificar posibles áreas de mejora.

Concisamente, este trabajo de tesis se justifica por su contribución a la optimización y comprensión de procesos químicos de precipitación mediante la utilización de herramientas computacionales y experimentales. La creación de un trabajo teórico práctico detallado, junto con la validación experimental, permitirá avanzar en el campo de la predicción y caracterización de especies químicas, facilitando así el desarrollo de nuevas aplicaciones educativas e industriales y científicas.

# Marco teórico

# 1. CONCEPTOS BÁSICOS DE QUÍMICA

La química es una disciplina fascinante y fundamental que se encarga del estudio de la materia, sus propiedades, la composición de los elementos y las transformaciones que éstos pueden experimentar. Esta ciencia desempeña un papel esencial en nuestra vida cotidiana y en la comprensión del mundo que nos rodea. La química se adentra en el reino de lo minúsculo, explorando los átomos y las moléculas, las unidades básicas que componen la materia. Cada elemento químico en la tabla periódica tiene su propio conjunto único de átomos, con propiedades y comportamientos específicos. La combinación de estos átomos en moléculas da lugar a una variedad infinita de sustancias con una amplia gama de propiedades y aplicaciones.

Las reacciones químicas implican la transformación de sustancias (reactivos) en otras sustancias diferentes (productos) mediante la ruptura y la formación de enlaces químicos. Las ecuaciones químicas son una herramienta para representar de manera simbólica estas reacciones y prever los resultados.

Uno de los conceptos clave en química es el equilibrio químico, que describe un estado en el cual las tasas de las reacciones directa e inversa son iguales, lo que resulta en concentraciones constantes de reactivos y productos. El estudio del equilibrio químico es primordial para comprender cómo funcionan muchas reacciones químicas en la práctica y cómo se pueden optimizar para obtener productos deseados. La química no solo es una ciencia teórica, sino que también tiene aplicaciones prácticas en una amplia variedad de campos, desde la medicina y la farmacia hasta la industria alimentaria, la energía y la protección del medio ambiente. En resumen, la química es la ciencia que nos permite comprender y manipular la materia a nivel molecular, abriendo puertas a un mundo de posibilidades en la ciencia, la tecnología y la innovación.

A continuación, se definirán algunos conceptos básicos necesarios para facilitar la comprensión del software HYDRA-MEDUSA.

## 1.1 Átomo

Un átomo es la unidad básica y fundamental de la materia. Es la estructura más pequeña de un elemento químico que aún mantiene las propiedades características de ese elemento. Los átomos

son los componentes básicos de todos los elementos que componen el universo y están compuestos por tres partículas subatómicas principales:

### *Protones*

Los protones son partículas subatómicas con carga eléctrica positiva (+). Se encuentran en el núcleo del átomo y son esenciales para determinar la identidad del elemento químico. Cada elemento de la tabla periódica tiene un número único de protones en su núcleo, conocido como su número atómico.

### *Neutrones*

Los neutrones son partículas subatómicas que no tienen carga eléctrica (carga neutra). Al igual que los protones, se encuentran en el núcleo del átomo. Los neutrones contribuyen a la masa del núcleo, pero no afectan la carga eléctrica del átomo.

### *Electrones*

Los electrones son partículas subatómicas con carga eléctrica negativa. Orbitan alrededor del núcleo en órbitas o niveles de energía específicos. Los electrones determinan las propiedades químicas del átomo y están involucrados en las interacciones químicas.

La distribución de los electrones alrededor del núcleo se organiza en capas electrónicas o niveles de energía. Cada nivel de energía puede contener un número máximo de electrones, y los electrones se distribuyen en estas capas de acuerdo con un conjunto de reglas específicas. La estructura de un átomo se asemeja a un "*sistema planetario*" en miniatura, donde el núcleo es el "*sol*" y los electrones son los "*planetas*" que orbitan alrededor de él. Sin embargo, esta analogía tiene limitaciones y no refleja con precisión la naturaleza cuántica de los electrones, que no siguen trayectorias definidas como los planetas alrededor del sol, sino que están descritos por distribuciones de probabilidad llamadas orbitales.

## 1.2 Elementos Químicos

Los elementos químicos son las sustancias más simples y fundamentales que componen la materia. Cada elemento está compuesto por átomos del mismo tipo, lo que significa que todos los átomos de un elemento tienen el mismo número de protones en su núcleo. La cantidad de protones en un átomo se llama "número atómico" y es único para cada elemento. Los elementos

se representan con símbolos químicos, que son abreviaturas de una o dos letras. Los elementos pueden encontrarse en diferentes estados de la materia, como sólidos, líquidos o gases, dependiendo de la temperatura y la presión. Se conocen 118 elementos químicos en la naturaleza, y han sido clasificados en la tabla periódica, estos elementos son prácticamente la base de toda la química y de la materia que nos rodea.

## 1.3 Tabla Periódica

La tabla periódica es una organización sistemática de los elementos químicos en función de sus propiedades físicas y químicas. Fue desarrollada a lo largo del tiempo por varios científicos, pero la versión moderna es generalmente atribuida a Dimitri Mendeléyev, quien la presentó en 1869.

Las características clave de la tabla periódica son las siguientes:

### *Grupos o Familias*

Las columnas verticales de la tabla periódica se conocen como grupos o familias. Los elementos en un mismo grupo comparten características químicas similares debido a tener la misma configuración electrónica en su capa más externa. Por ejemplo, el grupo 1 (la primera columna) contiene los metales alcalinos como el sodio y el potasio, que son altamente reactivos.

### *Períodos*

Las filas horizontales de la tabla periódica se llaman períodos. Cada período representa una nueva capa electrónica en la estructura de los átomos de los elementos. A medida que avanzas de izquierda a derecha en un período, el número de protones y electrones aumenta, lo que afecta las propiedades químicas.

### *Números Atómicos*

Los elementos están dispuestos en orden creciente de número atómico, que es el número de protones en el núcleo de un átomo. Este número aumenta de izquierda a derecha y de arriba abajo en la tabla periódica.

### *Propiedades Químicas y Físicas*

La ubicación de un elemento en la tabla periódica proporciona información valiosa sobre sus propiedades. Los elementos en un mismo grupo tienden a tener propiedades químicas similares.

Por ejemplo, los gases nobles en el grupo 18 son conocidos por su estabilidad y falta de reactividad.

### *Bloques*

La tabla periódica se divide en bloques, cada bloque se refiere a los niveles de energía en los que los electrones se encuentran distribuidos alrededor del núcleo de un átomo. Los bloques incluyen el bloque s, el bloque p, el bloque d y el bloque f.

La tabla periódica es una gran herramienta, ya que permite predecir el comportamiento de los elementos y compuestos, así como entender las relaciones entre ellos. También se utiliza para determinar la configuración electrónica de los átomos y comprender cómo se forman los enlaces químicos. La organización de la tabla periódica es una de las claves para el estudio y la comprensión de la química.

## 1.4 Moléculas

Una molécula es la estructura más pequeña de una sustancia que retiene todas las propiedades químicas y físicas de esa sustancia. Está formada por dos o más átomos que están unidos entre sí mediante enlaces químicos. Los átomos en una molécula pueden ser del mismo elemento (como en $O_2$, una molécula de oxígeno) o de diferentes elementos (como en $H_2O$, una molécula de agua). Las moléculas pueden ser muy simples, como las moléculas de oxígeno ($O_2$), que consisten en dos átomos de oxígeno unidos por enlaces covalentes, o pueden ser muy complejas, como las moléculas de proteínas y ADN en los seres vivos. Las moléculas pueden ser sólidas, líquidas o gaseosas a temperatura ambiente, dependiendo de la naturaleza de los átomos y los enlaces que las componen. Las reacciones químicas implican la ruptura y formación de enlaces entre átomos para crear nuevas moléculas.

## 1.5 Compuestos

Un compuesto químico es una sustancia pura en cualquiera de los estados de la materia, que está formada por la combinación de dos o más elementos en proporciones fijas y definidas mediante enlaces químicos. Los compuestos tienen una estructura química específica y propiedades distintas de los elementos que los componen. Por ejemplo, el agua ($H_2O$) es un compuesto formado por dos átomos de hidrógeno y uno de oxígeno, y tiene propiedades y comportamientos

diferentes a los de sus elementos constituyentes. Los compuestos químicos pueden ser orgánicos o inorgánicos. Los compuestos se representan mediante fórmulas químicas que muestran la proporción de átomos de cada elemento en la molécula. Las reacciones químicas implican la combinación o descomposición de compuestos para formar nuevos compuestos, y las leyes de la estequiometría (relación de masas) gobiernan estas transformaciones químicas.

## 1.6 Electrones de Valencia

Los electrones de valencia son los electrones ubicados en la capa más externa de un átomo, estos electrones son los responsables de las interacciones químicas y determinan en gran medida las propiedades químicas de un elemento. Los electrones de valencia están más alejados del núcleo y, por lo tanto, son los más influenciados por las fuerzas externas y participan en las reacciones químicas, conocer la cantidad de electrones de valencia de un átomo es importante porque influye en su capacidad para formar enlaces químicos con otros átomos. La mayoría de los átomos tienden a alcanzar una configuración electrónica estable, que a menudo involucra tener ocho electrones de valencia, siguiendo la regla del octeto.

## 1.7 Regla del Octeto

La regla del octeto establece que la mayoría de los átomos tienden a ganar, perder o compartir electrones para que puedan tener ocho electrones de valencia en su capa más externa (excepto el hidrógeno y el helio, que son estables con dos electrones de valencia). Esto se basa en la idea de que una capa de electrones completa con ocho electrones es más estable y menos reactiva que una capa incompleta. La regla del octeto es especialmente aplicable a los elementos no metálicos, que tienden a ganar electrones para alcanzar ocho electrones de valencia y formar aniones (iones negativos), o perder electrones para alcanzar ocho electrones de valencia y formar cationes (iones positivos). Por ejemplo, el cloro, un elemento del grupo 17, grupo de los halógenos, tiene siete electrones de valencia y tiende a ganar un electrón para alcanzar ocho electrones de valencia y convertirse en un ion $Cl^-$, con carga negativa. Los elementos metálicos, por otro lado, tienden a perder electrones y formar cationes con una configuración de electrones estable. Por ejemplo, el sodio, un elemento del grupo 1, tiene un electrón de valencia y tiende a perder este electrón para convertirse en un ion $Na^+$. La regla del octeto es una guía útil para predecir cómo los átomos se combinarán para formar compuestos químicos y qué tipo de enlaces

químicos se formarán (iónicos o covalentes). Sin embargo, no es una regla rígida para todos los compuestos químicos, ya que hay excepciones y situaciones en las que los átomos pueden tener menos de ocho electrones de valencia o más de ocho en ciertas circunstancias.

## 1.8 Tipos de enlaces químicos

Los enlaces químicos son las fuerzas fundamentales que mantienen unidos a los átomos en las moléculas y en los compuestos químicos. Son esenciales para comprender la naturaleza de la materia y cómo los elementos se combinan para formar una amplia variedad de sustancias en nuestro mundo. Existen tres tipos principales de enlaces químicos:

El *enlace iónico* que se forma cuando dos átomos tienen una diferencia significativa en su electronegatividad, lo que significa que uno tiene una mayor atracción por los electrones que el otro. En este caso, un átomo cede electrones para formar un ion positivo (catión), mientras que el otro átomo acepta esos electrones para convertirse en un ion negativo (anión). Los iones opuestos se atraen mutuamente debido a sus cargas eléctricas opuestas y se unen para formar un compuesto iónico. Un ejemplo común de esto es el cloruro de sodio (NaCl), donde los átomos de sodio ($Na^+$) cedieron un electrón a los átomos de cloro ($Cl^-$), quedando ambos unidos con carga cero.

El *enlace covalente*, ocurre cuando dos átomos comparten pares de electrones en su capa más externa para lograr una configuración electrónica más estable. Esto sucede típicamente entre átomos que tienen electronegatividades similares y que desean alcanzar una configuración similar a la de los gases nobles. Un ejemplo es la molécula de agua ($H_2O$), donde dos átomos de hidrógeno comparten electrones con un átomo de oxígeno.

En el *enlace metálico*, los electrones se mueven libremente entre los átomos en una red tridimensional de iones positivos. Esto da lugar a una "nube" de electrones móviles que rodea los iones metálicos. Los metales exhiben propiedades únicas debido a esta estructura, como la conductividad eléctrica y térmica, la maleabilidad y la ductilidad. Un ejemplo es el cobre (Cu), donde los electrones se mueven libremente entre los átomos de cobre en una estructura metálica.

Estos enlaces químicos son básicos para entender las propiedades y el comportamiento de las sustancias químicas, la forma en que los átomos se unen y comparten electrones determina si una sustancia será un gas, un líquido o un sólido, cuán fuerte será, su conductividad eléctrica y muchas otras características que son esenciales para la química y la ciencia de los materiales.

## 1.9 Reacciones químicas

Una reacción química es un proceso en el cual una o más sustancias, llamadas reactivos, se transforman en una o más sustancias diferentes, llamadas productos. Durante una reacción química, los enlaces entre los átomos se rompen y se forman nuevos enlaces para crear las sustancias finales. Es importante destacar que los átomos no se crean ni se destruyen en una reacción química, solo se reorganizan para formar nuevas sustancias. Las reacciones químicas pueden clasificarse en diferentes tipos, como reacciones de síntesis, descomposición, sustitución y redox, entre otras. Estos tipos se refieren a los cambios específicos que experimentan los reactivos durante la reacción.

## 1.10 Ecuaciones químicas

Una ecuación química es una representación simbólica de una reacción química. Proporciona información sobre los reactivos, los productos y las proporciones en las que participan. Las ecuaciones químicas siguen ciertas convenciones para expresar de manera clara la información de la reacción. Los elementos clave en una ecuación química son los siguientes:

*Reactivos y productos:* Los compuestos químicos involucrados en la reacción se representan mediante fórmulas químicas. Los reactivos se colocan en el lado izquierdo de la flecha (A y B), y los productos en el lado derecho (C y D).

$$\boldsymbol{A + B \rightarrow C + D} \qquad \textbf{( 1 )}$$

*Flecha de reacción:* Se utiliza una flecha para indicar la dirección de la reacción. La punta de la flecha apunta hacia los productos. Es posible que la flecha tenga ambos sentidos (↔), la reacción es reversible, es decir, los productos pueden regresar a ser reactivos.

*Coeficientes estequiométricos:* Números colocados delante de las fórmulas químicas para indicar la proporción en la que los reactivos y productos participan en la reacción. Estos coeficientes se

utilizan para equilibrar la ecuación, asegurando que la cantidad total de átomos de cada elemento sea la misma en ambos lados de la ecuación. Por ejemplo, la siguiente ecuación química:

$$2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O \qquad (2)$$

En esta ecuación se representa una reacción entre el hidrógeno molecular ($H_2$) y el oxígeno molecular ($O_2$) para formar agua ($H_2O$). Indicando que dos moléculas de hidrógeno reaccionan con una molécula de oxígeno para producir dos moléculas de agua.

## 1.11 Estequiometría

La estequiometría es una rama de la química que se centra en el estudio de las relaciones cuantitativas entre las sustancias que participan en una reacción química. Su objetivo principal es entender y calcular cómo los diferentes reactivos se combinan en una reacción química para formar productos, teniendo en cuenta la proporción de átomos y moléculas involucradas. Los cálculos estequiométricos se basan en la ley de conservación de la masa, que establece que la masa total de los reactivos es igual a la masa total de los productos en una reacción química. Además, las reacciones químicas ocurren en proporciones fijas y definidas de acuerdo con las relaciones de masa de los elementos involucrados, lo que se conoce como las relaciones estequiométricas.

## 1.12 Uso de fórmulas químicas y coeficientes estequiométricos.

El uso de fórmulas químicas y coeficientes estequiométricos es primordial en la química para representar y comprender las reacciones químicas. Las fórmulas químicas son representaciones abreviadas de las sustancias químicas, y permiten identificar la composición de los compuestos de manera concisa y precisa. Por ejemplo, $H_2O$ representa el agua, donde el subíndice 2 indica que una molécula de agua está formada por dos átomos de hidrógeno (H) y un átomo de oxígeno (O). Los coeficientes estequiométricos, por otro lado, son números enteros que se utilizan en las ecuaciones químicas para equilibrarlas y expresar las relaciones proporcionales en una reacción química. Estos coeficientes indican la cantidad relativa de cada sustancia involucrada en la reacción. Por ejemplo, en la ecuación de la combustión del metano ($CH_4$) en oxígeno ($O_2$) para formar dióxido de carbono ($CO_2$) y agua ($H_2O$):

$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O \quad (3)$$

El coeficiente 2 antes del $O_2$ y del $H_2O$ indica que se necesitan dos moléculas de oxígeno para reaccionar completamente con una molécula de metano, produciendo una molécula de dióxido de carbono y dos moléculas de agua. El uso de estas fórmulas y coeficientes estequiométricos es esencial para varios propósitos, por ejemplo:

*Equilibrio de ecuaciones químicas:* Los coeficientes estequiométricos se utilizan para igualar el número de átomos de cada elemento en ambos lados de una ecuación química, cumpliendo con la ley de conservación de la masa. Esto asegura que no se creen ni se destruyan átomos en una reacción química, sino que se reorganicen.

*Cálculos estequiométricos:* Las fórmulas y los coeficientes permiten realizar cálculos estequiométricos para determinar la cantidad de reactivo necesaria o la cantidad de producto formada en una reacción química, esto es crucial en la planificación y el control de reacciones químicas en el laboratorio y la industria.

*Identificación de sustancias:* Las fórmulas químicas permiten identificar y comunicar sustancias químicas de manera única, lo que es esencial para la precisión en la investigación científica, la seguridad y la comunicación en el ámbito químico.

Para llevar a cabo cálculos estequiométricos, se utilizan las fórmulas químicas de los reactivos y productos, así como los coeficientes estequiométricos en una ecuación química balanceada. Estos coeficientes indican las cantidades relativas en las que las sustancias reaccionan y se producen. Los pasos típicos en un cálculo estequiométrico incluyen:

*Equilibrio de la ecuación química:* Antes de iniciar cualquier cálculo estequiométrico, se debe verificar que la ecuación química esté balanceada correctamente. Esto implica asegurarse de que el número de átomos de cada elemento en los reactivos sea igual al número de átomos en los productos. Si la ecuación no está balanceada, se deben ajustar los coeficientes estequiométricos adecuadamente.

*Identificación de la información dada y lo que se busca:* En un problema estequiométrico, es primordial reconocer qué información se proporciona inicialmente (generalmente en moles,

gramos o volumen) y qué se desea calcular, esto permite tomar la dirección adecuada en el cálculo.

*Conversión de cantidades conocidas a moles:* Si la información proporcionada se encuentra en unidades como gramos o volumen de gas, se debe realizar la conversión a moles utilizando la masa molar o el volumen molar, según sea necesario. La masa molar se refiere a la masa en gramos contenida en un mol de la sustancia (aproximadamente $6.022x10^{23}$ átomos o moléculas).

*Uso de coeficientes estequiométricos:* Los coeficientes presentes en la ecuación química se utilizan para establecer relaciones estequiométricas entre los moles de las sustancias involucradas. Estos coeficientes indican las proporciones en las que las sustancias reaccionan y se convierten en productos, se pueden emplear para calcular la relación molar entre reactivos y productos.

*Resolución del problema:* Una vez que se han establecido las relaciones estequiométricas, se puede calcular la cantidad de la sustancia deseada en moles o en otras unidades, según las especificaciones del problema. Esto implica el uso de reglas de tres, multiplicación y división, teniendo en cuenta las relaciones entre las sustancias.

Estos cálculos son esenciales en la síntesis química, la determinación de las cantidades necesarias de reactivos y la predicción de los rendimientos de las reacciones. Además, la estequiometría es crucial en la formulación de productos químicos, la producción industrial, la química analítica y la investigación científica.

## 1.13 Nomenclatura de compuestos químicos.

La nomenclatura de compuestos químicos es un sistema de reglas y convenciones establecidas para dar nombres específicos y sistemáticos a las sustancias químicas. Esta disciplina es esencial en la química, ya que permite a científicos, estudiantes y profesionales de todo el mundo comunicarse de manera efectiva y precisa acerca de las sustancias químicas y sus composiciones. La nomenclatura de compuestos químicos se divide en dos categorías principales: nomenclatura orgánica y nomenclatura inorgánica.

En la nomenclatura orgánica, se nombran compuestos químicos que contienen carbono, incluyendo hidrocarburos como alcanos, alquenos y alquinos, así como compuestos más

complejos como alcoholes, ácidos carboxílicos y ésteres. La IUPAC (Unión Internacional de Química Pura y Aplicada) es la entidad encargada de establecer las reglas para la nomenclatura orgánica. Estas reglas se basan en la estructura y la función de las moléculas, y permiten a los químicos asignar nombres específicos a una amplia variedad de compuestos orgánicos.

Por otro lado, en la nomenclatura inorgánica, se nombran compuestos que generalmente no contienen carbono, a excepción de los cerámicos tales como carburos, nitruros, sulfuros. Aquí también, la IUPAC ha establecido un conjunto de reglas para nombrar compuestos inorgánicos, como sales, óxidos, ácidos y bases. Los nombres se derivan de la composición química y la estructura de los compuestos, lo que facilita la identificación de sustancias químicas inorgánicas en una amplia gama de contextos, desde la química analítica hasta la industria.

La nomenclatura de compuestos químicos es la comunicación científica, ya que un nombre químico adecuado proporciona información crucial sobre la composición y la estructura de una sustancia, incluso cuando no se dispone de una representación visual. Además, esta nomenclatura es esencial en la industria química, la investigación, la enseñanza y la seguridad, ya que garantiza que las sustancias químicas se identifiquen de manera inequívoca, evitando confusiones o errores potencialmente peligrosos.

## 1.14 Definición de solución, solvente, soluto y suspensión

Las soluciones son uno de los conceptos fundamentales en la química y para comprenderlos plenamente, es esencial explorar las definiciones de soluciones, solventes y solutos en detalle.

### *Solución*

Una solución es una mezcla homogénea y estable de dos o más sustancias. En una solución, las sustancias se dispersan de manera uniforme en un solvente, creando una fase única. Las soluciones pueden ser sólidas, líquidas o gaseosas. Por ejemplo, el aire que respiramos es una solución gaseosa en la que el nitrógeno, el oxígeno y otros gases están mezclados en proporciones específicas.

### *Solvente*

El solvente es la sustancia en mayor cantidad en una solución acuosa, la que disuelve a las otras sustancias y en la que estas se dispersan. Es el componente que se encuentra en el estado en el

que la solución es más comúnmente representada. Por ejemplo, en una solución de sal (NaCl) en agua, el agua es el solvente y la sal es el soluto. El solvente es responsable de mantener las partículas del soluto en suspensión y garantizar que la solución sea homogénea.

### *Solutos*

Los solutos son las sustancias disueltas en el solvente. Pueden ser sólidos, líquidos o gaseosos y se encuentran en menor cantidad en comparación con el solvente. Los solutos pueden ser simples o compuestos y se dispersan en el solvente debido a la interacción entre sus partículas y las del solvente.

### *Suspensión*

Una suspensión es una mezcla heterogénea de partículas sólidas o líquidas dispersas en un medio líquido o gaseoso. A diferencia de las soluciones, las suspensiones no son uniformes y las partículas pueden sedimentarse con el tiempo. Se pueden separar mediante filtración. Las suspensiones pueden involucrar procesos físicos y en algunos casos, como en la formación de suspensiones coloidales, pueden presentar propiedades intermedias entre soluciones y suspensiones.

Es importante destacar que en ocasiones hay confusión entre los términos "solución" y "suspensión", especialmente porque ambos implican mezclas. La clave para distinguirlos radica en la uniformidad de la mezcla. Mientras que una solución es uniforme en toda su extensión, una suspensión muestra variaciones y puede decantarse o sedimentarse con el tiempo. La claridad de la distinción entre ambos conceptos es crucial para entender los diferentes tipos de mezclas en química.

## 1.15 Disolución de sales, ácidos y bases comunes en agua

La disolución de sales, ácidos y bases en agua es un proceso importante en la química. Cuando una sal, ácido o base se disuelve, se separa en sus iones constituyentes que pueden participar en diversas reacciones químicas. Este proceso es clave para muchas aplicaciones en metalurgia, síntesis de materiales, en la química industrial, en biología y en las ciencias ambientales, etc. Cuando estas especies iónicas quedan disueltas en agua, las moléculas de agua rodean los iones

positivos y negativos, separándolos y dispersándolos uniformemente en la solución. Este proceso se llama disociación. *(Chang, R. (2010) (- Atkins, P.,)*

## *Ejemplos de Sales Comunes*

***Cloruros:***

**a)** Cloruro de sodio (NaCl):

Disolución: $NaCl_{(s)} \rightarrow Na^{+}_{(aq)} + Cl^{-}_{(aq)}$

Uso: Sal de mesa, conservación de alimentos.

**b)** Cloruro de calcio ($CaCl_2$):

Disolución: $CaCl_{2(s)} \rightarrow Ca^{2+}_{(aq)} + 2Cl^{-}_{(aq)}$

Uso: Control de hielo en carreteras, agente desecante.

***Nitratos:***

**a)** Nitrato de potasio ($KNO_3$):

Disolución: $KNO_{3(s)} \rightarrow K^{+}_{(aq)} + NO_3^{-}{}_{(aq)}$

Uso: Fertilizantes, pólvora.

**b)** Nitrato de plata ($AgNO_3$):

Disolución: $AgNO_{3(s)} \rightarrow Ag^{+}_{(aq)} + NO_3^{-}{}_{(aq)}$

Uso: Fotografía, medicina (antiséptico).

***Sulfatos:***

**a)** Sulfato de cobre ($CuSO_4$):

Disolución: $CuSO_{4(s)} \rightarrow Cu^{2+}_{(aq)} + SO_4^{2-}{}_{(aq)}$

Uso: Agricultura (fungicida), tratamiento de agua.

**b)** Sulfato de sodio ($Na_2SO_4$):

Disolución: $Na_2SO_{4(s)} \rightarrow 2Na^{+}_{(aq)} + SO_4^{2-}{}_{(aq)}$

Uso: Industria papelera, detergentes.

***Otras Sales:***

**a)** Carbonato de calcio ($CaCO_3$):

Disolución parcial: $CaCO_{3(s)} \leftrightarrow Ca^{2+}_{(aq)} + CO_3^{2-}{}_{(aq)}$ (en presencia de $CO_2$ y agua).

Uso: Construcción (cemento), suplemento alimenticio.

**b)** Fosfato de potasio ($K_3PO_4$):

Disolución: $K_3PO_{4(s)} \rightarrow 3K^+_{(aq)} + PO_4^{3-}{}_{(aq)}$

Uso: Fertilizantes, aditivos alimentarios.

***Ácidos:***

**a)** Ácido clorhídrico (HCl):

Disolución: $HCl_{(g)} \rightarrow H^+_{(aq)} + Cl^-_{(aq)}$

Uso: Limpieza industrial, producción de cloruros.

**b)** Ácido sulfúrico ($H_2SO_4$):

Disolución: $H_2SO_{4(l)} \rightarrow 2H^+_{(aq)} + SO_4^{2-}{}_{(aq)}$

Uso: Baterías de automóvil, fabricación de fertilizantes.

**c)** Ácido nítrico ($HNO_3$):

Disolución: $HNO_3(l) \rightarrow H^+_{(aq)} + NO_3^-{}_{(aq)}$

Uso: Producción de explosivos, fertilizantes.

**d)** Ácido acético ($CH_3COOH$):

Disolución: $CH_3COOH(l) \leftrightarrow H^+_{(aq)} + CH_3COO^-_{(aq)}$

Uso: Conservante alimenticio, vinagre.

***Bases:***

**a)** Hidróxido de sodio (NaOH):

Disolución: $NaOH(s) \rightarrow Na^{+}_{(aq)} + OH^{-}_{(aq)}$

Uso: Fabricación de jabones, papel.

**b)** Hidróxido de potasio (KOH):

Disolución: $KOH(s) \rightarrow K^{+}_{(aq)}) + OH^{-}_{(aq)}$

Uso: Producción de biodiésel, fabricación de detergentes.

**c)** Hidróxido de calcio ($Ca(OH)_2$):

Disolución: $Ca(OH)_{2(s)} \rightarrow Ca^{2+}_{(aq)} + 2OH^{-}_{(aq)}$

Uso: Tratamiento de aguas, construcción (cal).

**d)** Amoníaco ($NH_3$):

Disolución: $NH_{3(g)} + H_2O_{(l)} \rightarrow NH_4^{+}_{(aq)} + OH^{-}_{(aq)}$

Uso: Fertilizantes, limpieza doméstica.

## 1.16 Moles y masa molar

### *Mol*

Es la unidad básica de cantidad de sustancia en el Sistema Internacional de Unidades. Un mol de cualquier sustancia contiene aproximadamente $6.022x10^{23}$ entidades elementales, como átomos, moléculas o iones, este número es conocido como el número de Avogadro. Los moles son utilizados para contar y expresar cantidades de sustancias químicas en una escala macroscópica. Por ejemplo, un mol de átomos de carbono tiene la misma cantidad de átomos que un mol de átomos de oxígeno.

### *Masa molar*

La masa molar es la masa de un mol de átomos, moléculas o iones de una sustancia. Se expresa en gramos por mol (g/mol). La masa molar de un elemento es su masa atómica expresada en gramos/mol, mientras que la masa molar de un compuesto se calcula sumando las masas atómicas de los átomos que lo componen.

$$\boldsymbol{Masa\ Molar}\ (\frac{\boldsymbol{g}}{\boldsymbol{mol}}) = \frac{\boldsymbol{Masa\ de\ la\ sustancia}(\boldsymbol{g})}{\boldsymbol{Cantidad\ de\ sustancia\ en\ moles}(\boldsymbol{mol})} \quad \textbf{( 4 )}$$

Ambos conceptos, son esenciales en química. Los moles permiten relacionar cantidades de sustancias en el nivel microscópico, mientras que la masa molar proporciona una herramienta para convertir entre la escala macroscópica y el nivel de partículas. Estos conceptos son esenciales para realizar cálculos estequiométricos y para comprender la cantidad de sustancias en una reacción química.

## 1.17 Medidas de concentración: Molaridad, molalidad, fracción molar y porcentaje en masa

Los cálculos de concentración, que involucran molaridad, molalidad y fracción molar, son aspectos basicos en la química para cuantificar la cantidad de soluto presente en una solución y entender cómo los componentes se distribuyen en una mezcla homogénea.

### *Molaridad*

Es una medida de concentración que expresa la cantidad de moles de soluto en un litro de solución (moles por litro, mol/L). Para calcular la molaridad, se divide la cantidad de moles de soluto entre el volumen de la solución en litros. Esta medida es ampliamente utilizada en laboratorios y en la industria, y es especialmente útil en reacciones químicas, ya que proporciona la cantidad de soluto en relación con el volumen total de la solución.

$$\boldsymbol{Molaridad}\ (\boldsymbol{Mol/litro}) = \frac{\textbf{Número de moles de soluto (moles)}}{\boldsymbol{Volumen\ de\ la\ solución\ en\ litros}(\boldsymbol{Litro})} \quad \textbf{( 5 )}$$

### *Molalidad*

Es la cantidad de moles de soluto por kilogramo de disolvente (mol/kg). A diferencia de la molaridad, la molalidad no depende de la temperatura ni de la densidad de la solución, lo que la hace especialmente útil en situaciones en las que estas condiciones varían. Para calcular la molalidad, se divide la cantidad de moles de soluto entre la masa de disolvente en kilogramos.

$$\boldsymbol{Molaridad\ (Mol/litro) = \frac{\text{Número de moles de soluto (moles)}}{Volumen\ de\ la\ solución\ en\ litros (Litro)}} \qquad \textbf{( 6 )}$$

### *Fracción molar*

Es una medida adimensional que expresa la proporción de moles de un componente en relación con el total de moles de solución. Para calcular la fracción molar, se divide el número de moles de un componente entre el número total de moles en la solución. La fracción molar es especialmente valiosa para comprender la composición relativa de las sustancias en una mezcla y para predecir propiedades físicas de la solución, como la presión de vapor. Se representa con la letra griega "chi" (χ) y se calcula con la fórmula:

$$\boldsymbol{Fracción\ molar\ (\chi) = \frac{\text{Número de moles de una sustancia específica}}{Numero\ total\ de\ moles\ en\ la\ solución}} \qquad \textbf{( 7 )}$$

*Si se requiere en porcentaje (%), solo se multiplica por 100.*

### *Porcentaje en Masa (%)*

El porcentaje en masa indica la masa de soluto en relación con la masa total de la solución, multiplicado por 100. Se calcula mediante la fórmula:

$$\%\ \boldsymbol{en\ masa} = \left(\frac{\textbf{Masa del soluto}}{\boldsymbol{Masa\ total\ de\ la\ solución}}\right)\boldsymbol{x100} \qquad \textbf{( 8 )}$$

Estos cálculos de concentración son básicos en la preparación de soluciones, la química analítica, la investigación científica y diversas aplicaciones industriales. Además, proporcionan información importante para entender y controlar reacciones químicas, así como para diseñar procesos químicos eficientes en la industria.

## 1.18 Efecto de la concentración en las reacciones químicas.

El efecto de la concentración en las reacciones químicas es un principio medular en la cinética química y se relaciona estrechamente con la velocidad y la eficiencia de las reacciones. La concentración de los reactivos en una reacción química influye significativamente en la velocidad y la dirección en que dicha reacción ocurre.

En términos generales, el aumento de la concentración de los reactivos suele acelerar la velocidad de una reacción. Esto se debe a que, en una solución más concentrada, hay más partículas de reactivos colisionando entre sí, lo que aumenta la probabilidad de que colisionen con la energía suficiente para que ocurra una reacción química. Esta relación es expresada en la ecuación de velocidad de reacción, donde la velocidad es directamente proporcional al producto de las concentraciones de los reactivos elevados a sus respectivos coeficientes estequiométricos. Por ejemplo, de la reacción:

$$\boldsymbol{aA + bB \rightleftharpoons cC + dD} \qquad \textbf{( 9 )}$$

La expresión de la constante de la velocidad de reacción, se define como:

$$\boldsymbol{V = k[A]^m[B]^n} \qquad \textbf{( 10 )}$$

Por otro lado, la disminución de la concentración de los reactivos generalmente ralentiza una reacción debido a la disminución de colisiones efectivas.

El efecto de la concentración también es evidente en el equilibrio químico. Cambios en la concentración de reactivos o productos pueden desplazar el equilibrio en una dirección específica, siguiendo el principio de Le Chatelier. Por ejemplo, si se aumenta la concentración de uno de los reactivos en un equilibrio químico, la reacción se desplazará hacia el lado de los productos para contrarrestar el cambio en la concentración.

Este principio tiene implicaciones importantes en la química y en numerosos campos de aplicación, desde la síntesis de productos químicos en la industria hasta la regulación de reacciones en sistemas biológicos. La comprensión del efecto de la concentración en las reacciones químicas permite a los científicos y los ingenieros diseñar y controlar procesos químicos de manera más eficiente y predecir cómo las condiciones de reacción pueden influir en los resultados.

# 2. FUNDAMENTOS DE LA TERMODINÁMICA

La termodinámica es una disciplina en la física y la química que se ocupa del estudio de las transformaciones de la energía y la materia en sistemas físicos. En esencia, la termodinámica

busca comprender cómo la energía fluye y cómo la materia se transforma en respuesta a cambios en las condiciones ambientales. Estos principios son aplicables a una amplia variedad de sistemas, desde reacciones químicas y procesos industriales hasta el funcionamiento de motores y sistemas biológicos.

Los fundamentos de la termodinámica se basan en una serie de leyes y principios que rigen el comportamiento de sistemas termodinámicos. Estos principios son primordiales para entender conceptos clave como *la energía, el calor, el trabajo, la temperatura y la entropía*. La termodinámica proporciona las herramientas necesarias para predecir y controlar procesos físicos y químicos, así como para optimizar la eficiencia en una amplia variedad de aplicaciones.

## 2.1 Energía

La energía es un concepto en la física y la química que desempeña un papel esencial en todos los aspectos de la vida y en el funcionamiento del universo. Se define como la capacidad de realizar trabajo o producir cambios en un sistema. La energía se manifiesta en varias formas, incluyendo la energía cinética, que está asociada con el movimiento de objetos y la energía potencial, que se almacena debido a la posición o la configuración de un sistema. Además, la energía térmica se relaciona con la temperatura y el calor, mientras que la energía química se libera o se absorbe durante las reacciones químicas. Un principio fundamental en la física, conocido como *ley de conservación de la energía*, establece que la energía no puede crearse ni destruirse, solo puede transformarse de una forma a otra. Esto significa que la cantidad total de energía en un sistema aislado permanece constante. La comprensión de la energía es esencial en la termodinámica, que se ocupa del estudio de la transformación de la energía y la materia en sistemas físicos y químicos.

## 2.2 Entalpía

La entalpía más común, denotada como "$H_p$," es una función termodinámica especialmente útil en química y termodinámica que describe la cantidad total de energía calorífica en un sistema a presión constante (de ahí el subíndice p y que puede cambiar a “v” cuando el sistema está a un volumen constante). Se relaciona con la energía interna del sistema, que incluye la energía cinética y potencial de sus partículas, y la energía necesaria para mantener la presión constante durante una reacción química o un proceso. En una reacción química a presión constante, el cambio de entalpía ($\Delta H_p$) se relaciona con la cantidad de calor transferida al sistema o desde el

sistema. En otras palabras, $\Delta H_p$ representa la cantidad neta de calor liberada o absorbida durante una reacción química a presión constante.

La entalpía es especialmente valiosa para entender y predecir la termodinámica de reacciones químicas y procesos en los que la presión se mantiene constante, como muchas reacciones en solución acuosa y sistemas abiertos. La medición de $\Delta H_p$ es importante para determinar si una reacción química es exotérmica (libera calor) o endotérmica (absorbe calor), lo que tiene implicaciones importantes en la industria química y en la vida cotidiana.

## 2.3 Entropía

La entropía es una de las propiedades termodinámicas más principales, representada como "S," la entropía es una medida del grado de desorden o aleatoriedad presente en un sistema. Cuanto mayor sea la entropía, mayor será el desorden de los átomos que componen a un compuesto. Esta medida se relaciona con la cantidad de energía dispersa o no disponible para realizar trabajo en un sistema. El concepto de entropía se extiende a una amplia variedad de sistemas y procesos, desde la distribución de partículas en un gas hasta la organización de moléculas en una célula. La *segunda ley de la termodinámica* establece que, en un sistema aislado, la entropía tiende a aumentar con el tiempo. Esto significa que los sistemas naturales tienen una tendencia inherente a evolucionar hacia estados de mayor entropía o desorden. Esto es evidente en muchos aspectos de la vida cotidiana: una taza de café caliente (energía aplicada para alcanzar cierta temperatura) se enfría con el tiempo (energía desperdiciada), los objetos caen hacia abajo en lugar de flotar en el aire y las sustancias químicas tienden a mezclarse en lugar de permanecer separadas.

En ingeniería de Materiales, la entropía también está relacionada con la cristalinidad de un material, siendo un material cristalino un sistema altamente ordenado, hay menos desorden entre átomos, lo que se refleja en una menor entropía. En contraste, un sistema altamente desordenado como un sólido amorfo, hay mucho desorden atómico, lo que resulta en una entropía más alta.

## 2.4 Energía Libre de Gibbs

La energía libre de Gibbs, representada como "G" o "ΔG," es una función termodinámica que combina aspectos de la entalpía y la entropía en un solo término para evaluar la espontaneidad

de procesos químicos y físicos a temperaturas y presiones dadas. ΔG se relaciona con ΔH (el cambio en la entalpía) y ΔS (el cambio en la entropía) a través de la ecuación:

$$\boldsymbol{\Delta G = \Delta H - T\Delta S} \qquad \textbf{( 11 )}$$

*Donde:*

*ΔG es el cambio en la energía libre de Gibbs.*

*ΔH es el cambio en la entalpía.*

*ΔS es el cambio en la entropía.*

*T es la temperatura en kelvin.*

Esta ecuación permite predecir si un proceso o reacción química será espontáneo. Si ΔG es negativo (ΔG < 0), el proceso o la reacción es espontáneo y liberará energía. Si ΔG es positivo (ΔG > 0), el proceso no es espontáneo y requerirá energía para ocurrir. Si ΔG es igual a cero (ΔG = 0), el sistema está en equilibrio y no habrá cambios netos.

La energía libre de Gibbs es particularmente útil en química, ya que permite predecir si una reacción química ocurrirá de manera espontánea en condiciones dadas y proporciona información sobre la dirección en la que se llevará a cabo.

## 2.5 Primera Ley de la Termodinámica (Ley de la conservación de la energía)

La Primera Ley establece que la energía en un sistema aislado se conserva, es decir, no puede crearse ni destruirse, solo puede cambiar de forma. Esto se expresa en la ecuación:

$$\boldsymbol{\Delta U = Q - W} \qquad \textbf{( 12 )}$$

*Donde:*

*ΔU es el cambio en la energía interna del sistema.*

*Q representa el calor transferido al sistema.*

*W es el trabajo realizado por el sistema o sobre el sistema.*

En otras palabras, la Primera Ley afirma que la energía total en un sistema se mantiene constante, y cualquier cambio en la energía interna del sistema es el resultado de la transferencia de calor y el trabajo realizado.

## 2.6 Segunda Ley de la Termodinámica (Ley de la Entropía)

La Segunda Ley se enfoca en la dirección de los procesos termodinámicos y establece que la entropía, una medida de la dispersión de la energía en un sistema, tiende a aumentar con el tiempo en sistemas aislados. Esta ley se expresa en varias formas, incluyendo la afirmación de que el calor fluye de un objeto caliente a uno frío y que no se puede convertir completamente el calor en trabajo útil sin una pérdida neta de energía. En esencia, la segunda ley postula que los procesos naturales tienden a una mayor desorganización o dispersión de la energía, lo que se manifiesta en el aumento de la entropía. Esto lleva al concepto de la dirección irreversibilidad de los procesos, donde ciertos procesos no pueden revertirse espontáneamente a su estado original sin aportar energía adicional. Además, la segunda ley establece la base para comprender el concepto de eficiencia en máquinas térmicas, como los motores.

## 2.7 Entalpía de reacción

La entalpía de reacción, a menudo denotada como $\Delta H_{rxn}$, es una medida termodinámica que describe la cantidad de calor absorbido o liberado durante una reacción química a presión constante. Es una cantidad crucial para comprender la termodinámica de las reacciones químicas y su impacto en la energía y el equilibrio de una reacción. La entalpía de reacción se puede dividir en dos categorías:

### *Entalpía de reacción endotérmica*

En una reacción endotérmica, la entalpía de los productos es mayor que la entalpía de los reactivos. Esto significa que la reacción absorbe calor del entorno para llevarse a cabo. La ΔHrxn es positiva en una reacción endotérmica, ya que representa la cantidad de energía térmica que se necesita para que la reacción ocurra. Ejemplo: La descomposición del carbonato de calcio ($CaCO_3$) en óxido de calcio (CaO) y dióxido de carbono ($CO_2$) es una reacción endotérmica, ya que requiere una aportación de energía en forma de calor.

### *Entalpía de reacción exotérmica*

En una reacción exotérmica, la entalpía de los productos es menor que la entalpía de los reactivos. Esto significa que la reacción libera calor al entorno, La $\Delta H_{rxn}$ es negativa en una reacción exotérmica, ya que representa la cantidad de energía térmica que se libera durante la reacción.

*Ejemplo:* La combustión del metano ($CH_4$) en oxígeno ($O_2$) para producir dióxido de carbono ($CO_2$) y agua ($H_2O$) es una reacción exotérmica, ya que libera calor.

La entalpía de reacción se mide en julios (J) o en calorías (cal) y se puede determinar experimentalmente mediante calorimetría, que implica medir los cambios de temperatura en un sistema cerrado durante una reacción química. La ecuación general para calcular la entalpía de reacción en una reacción química es la siguiente:

$$\boldsymbol{\Delta Hrxn = H\,productos - H\,reactivos} \qquad \textbf{( 13 )}$$

*Donde:*

*ΔHrxn es la entalpía de reacción.*

*H productos es la entalpía total de los productos de la reacción.*

*H reactivos es la entalpía total de los reactivos de la reacción.*

La entalpía de reacción es una propiedad extensiva, lo que significa que su valor depende de la cantidad de sustancia que reacciona. Puede utilizarse para predecir si una reacción es endotérmica o exotérmica, y para calcular la cantidad de calor involucrada en una reacción química específica. También es una herramienta valiosa en la termodinámica química para entender la espontaneidad de las reacciones y su influencia en el equilibrio químico.

## 3. CONSTANTE DE EQUILIBRIO Y EQUILIBRIO QUÍMICO

El concepto de equilibrio químico se relaciona con la idea de que, en muchas reacciones químicas, los reactivos se transforman en productos, pero alcanzan un punto en el que las velocidades de las reacciones directa e inversa se igualan, en este estado, se dice que la reacción está en equilibrio.

El equilibrio químico es dinámico, lo que significa que las moléculas o iones en la mezcla continúan colisionando y reaccionando, pero a una velocidad constante. En este estado, las concentraciones de reactivos y productos permanecen relativamente constantes con el tiempo, lo que lleva a la idea de que no hay cambios netos en las cantidades de sustancias presentes. Sin embargo, es

importante comprender que el equilibrio no implica que las concentraciones de reactivos y productos sean iguales, solo que se mantienen constantes. Para cuantificar el equilibrio, se introduce la constante de equilibrio (K). La constante de equilibrio es una expresión que relaciona las concentraciones de los productos y los reactivos en una reacción química a una temperatura y presión específicas. Para una reacción general:

$$\boldsymbol{aA + bB \rightleftharpoons cC + dD} \qquad \textbf{( 14 )}$$

La expresión de la constante de equilibrio, *K*, se define como:

$$\boldsymbol{K = \frac{C^c}{A^a}\frac{D^d}{B^b}} \qquad \textbf{( 15 )}$$

*Donde:*

*[A], [B], [C], y [D] representan las concentraciones de A, B, C y D en el equilibrio.*

*a, b, c, y d son los coeficientes estequiométricos en la ecuación química balanceada.*

El valor de *K* es constante a una temperatura dada y proporciona información sobre la posición del equilibrio. Si *K* es mucho mayor que 1, significa que los productos están favorecidos en el equilibrio, y si *K* es mucho menor que 1, los reactivos están favorecidos. Si *K* está cerca de 1, las concentraciones de reactivos y productos están cerca de ser iguales.

El equilibrio químico es básico en numerosas aplicaciones, desde la síntesis química hasta la bioquímica, permite comprender y predecir cómo las reacciones químicas se comportan en condiciones reales y cómo los cambios en la concentración, la temperatura o la presión afectan el equilibrio. La constante de equilibrio, *K*, proporciona una herramienta poderosa para cuantificar y manipular el equilibrio químico y en última instancia, para diseñar procesos químicos y biológicos eficientes y sostenibles.

## 3.1 Ley de acción de masas y constante de equilibrio

La *ley de acción de masas* es un principio fundamental en la química que establece la relación entre las concentraciones de reactivos y productos en una reacción química en equilibrio. Esta ley, formulada por los químicos Guldberg y Waage en el siglo XIX, proporciona una base sólida

para comprender cómo se establece y se mantiene el equilibrio químico. La Ley de Acción de Masas establece que la velocidad de una reacción química está relacionada con el producto de las concentraciones de los reactivos, elevadas a una potencia igual a sus coeficientes estequiométricos en la ecuación química balanceada. Esto se expresa como:

$$\boldsymbol{aA + bB \rightleftharpoons cC + dD} \qquad \textbf{( 16 )}$$

La velocidad de la reacción es proporcional al producto de $A^a$ y $B^b$ para la reacción directa, y al producto de $C^c$ y $D^d$ para la reacción inversa.

La constante de equilibrio (K) se deriva de esta ley y relaciona las concentraciones de los reactivos y productos en un estado de equilibrio. Para la reacción anterior, la expresión de *K* es la constante de equilibrio, *K*, es independiente de las concentraciones iniciales y es una característica única de la reacción y la temperatura en cuestión. Además, *K* es una medida de la posición del equilibrio, es decir que, si *K* es mucho mayor que 1, significa que los productos están favorecidos, mientras que, si *K* es mucho menor que 1, los reactivos están favorecidos.

$$\boldsymbol{K = \frac{C^c}{A^a}\frac{D^d}{B^b}} \qquad \textbf{( 17 )}$$

El equilibrio químico se establece cuando la velocidad de la reacción directa es igual a la velocidad de la reacción inversa, lo que lleva a que las concentraciones de reactivos y productos permanezcan relativamente constantes en el tiempo. En este estado, *K* es constante y proporciona información sobre la composición de la mezcla en equilibrio.

La *ley de acción de masas* y la constante de equilibrio son fundamentales para comprender cómo las reacciones químicas alcanzan y mantienen un estado de equilibrio. Estos conceptos tienen aplicaciones en una amplia variedad de campos, desde la química industrial y la síntesis de productos químicos hasta la bioquímica y la farmacología, y son esenciales para diseñar y controlar procesos químicos y biológicos. La capacidad de predecir y manipular el equilibrio químico a través de la constante de equilibrio es una herramienta poderosa en la química y la ingeniería.

## 3.2 La importancia de la temperatura y la presión en los equilibrios químicos

La temperatura y la presión son dos variables críticas que desempeñan un papel fundamental en los equilibrios químicos y su comprensión es esencial para el diseño y control de reacciones químicas y procesos industriales. Estos dos factores pueden influir significativamente en la posición y la estabilidad de un equilibrio químico.

### *Temperatura en el equilibrio químico*

La temperatura afecta la constante de equilibrio (*K*) y, por lo tanto, la posición del equilibrio. Según el principio de *Le Chatelier*, un aumento en la temperatura desplazará el equilibrio en la dirección que absorbe calor y una disminución en la temperatura lo desplazará en la dirección que libera calor. Esto se debe a que *K* varía con la temperatura y un cambio en la temperatura cambia la energía cinética promedio de las moléculas en la reacción. En consecuencia, algunas reacciones son más favorecidas a temperaturas más altas, mientras que otras lo son a temperaturas más bajas. Comprender el efecto de la temperatura en el equilibrio es fundamental para optimizar procesos químicos y determinar las condiciones óptimas para obtener rendimientos deseados.

### *Presión en el equilibrio químico*

La presión influye en el equilibrio químico, especialmente en sistemas gaseosos. La Ley de *Boyle-Mariotte* establece que la presión y el volumen de un gas son inversamente proporcionales, y cuando se aplica a reacciones gaseosas, un cambio en la presión puede afectar la posición del equilibrio. Según el principio de *Le Chatelier*, un aumento en la presión desplazará el equilibrio hacia el lado con un menor número de moles de gas, mientras que una disminución en la presión tendrá el efecto contrario.

En resumen, la temperatura y la presión son factores críticos en la comprensión y manipulación de equilibrios químicos. La temperatura afecta la posición del equilibrio al cambiar la constante de equilibrio *(K)* y ajusta la energía cinética de las moléculas, mientras que la presión, especialmente en sistemas gaseosos, influye en el equilibrio al modificar el número de moles de gas. Esta comprensión es esencial para diseñar y controlar procesos químicos, optimizar rendimientos y garantizar que las reacciones químicas se lleven a cabo de manera eficiente y segura.

# 4. EQUILIBRIO EN SISTEMAS ACUOSOS

El equilibrio en sistemas acuosos se refiere a las reacciones químicas que ocurren en soluciones acuosas, es decir, en agua. Estas reacciones pueden ser *ácido-base*, *redox* (de transferencia de electrones) o *de formación de complejos*, entre otras. El equilibrio en sistemas acuosos es un concepto importante en química y se basa en el principio de que las tasas de reacción hacia adelante (formación de reactivos) y hacia atrás (formación de reactivos) son iguales, lo que resulta en una concentración constante de productos y reactivos. En este contexto, vamos a profundizar en el equilibrio ácido-base, el concepto de pH y pOH, así como la hidrólisis.

## 4.1 Equilibrio Ácido-Base

El equilibrio ácido-base es un tipo importante de equilibrio químico en soluciones acuosas. Implica la transferencia de protones (iones $H^+$) entre especies químicas. Los dos conceptos clave en el equilibrio ácido-base son los ácidos y las bases:

### *Acido*

Un ácido es una sustancia que puede donar un ion de hidrógeno ($H^+$) a otra sustancia. Ejemplos comunes de ácidos son el ácido clorhídrico (HCl) y el ácido acético ($CH_3COOH$).

### *Base*

Una base es una sustancia que puede aceptar un ion de hidrógeno ($H^+$). Ejemplos de bases incluyen el hidróxido de sodio (NaOH) y el amoníaco ($NH_3$).

En el equilibrio ácido-base, el agua ($H_2O$) también juega un papel importante ya que puede actuar tanto como un ácido (donando un ion $H^+$) como una base (aceptando un ion $H^+$).

La reacción ácido-base más básica es la disociación del agua:

$$\boldsymbol{H_2O \rightleftharpoons H^+ + OH^-} \qquad \textbf{( 18 )}$$

En esta reacción, el ion $H^+$ se llama ion hidrógeno o protón, y el ion $OH^-$ se llama ion hidroxilo. El equilibrio *ácido-base* se caracteriza por la constante de equilibrio, conocida como la constante de ionización del agua *(Kw),* que representa la concentración de iones $H^+$ y $OH^-$ en el agua a una temperatura dada:

$$\boldsymbol{Kw} = [\boldsymbol{H^+}]\,[\boldsymbol{OH^-}] \quad \textbf{( 19 )}$$

A 25°C, *Kw* tiene un valor de $1.0x10^{-14}$ $mol^2/L^2$, esto significa que, en una solución acuosa neutra a 25°C, la concentración de iones $H^+$ (y por lo tanto, $OH^-$) es de $1.0x10^{-7}$ mol/L. El equilibrio ácido-base se puede utilizar para calcular el pH y el pOH de una solución.

## 4.2 Conceptos de pH y pOH:

El pH y el pOH son dos medidas que indican la acidez o la basicidad de una solución, están relacionados a la concentración de iones $H^+$ (para el pH) y $OH^-$ (para el pOH) en una solución.

### *pH*

El pH es una medida de la acidez de una solución y se define como el negativo del logaritmo en base 10 de la concentración de iones $H^+$ en la solución. La fórmula es:

$$\boldsymbol{pH} = -\boldsymbol{log}[\boldsymbol{H^+}] \quad \textbf{( 20 )}$$

El pH varía de 0 a 14, donde un pH de 7 es neutro, un pH menor que 7 indica acidez y un pH mayor que 7 indica basicidad.

### *pOH*

El pOH es similar al pH, pero se enfoca en la concentración de iones $OH^-$ en la solución. Se define como el negativo del logaritmo en base 10 de la concentración de iones $OH^-$. La fórmula es:

$$\boldsymbol{pOH} = -\boldsymbol{log}[\boldsymbol{OH^-}] \quad \textbf{( 21 )}$$

Al igual que el pH, el pOH varía de 0 a 14.

La relación entre el pH y el pOH está dada por la siguiente ecuación:

$$\boldsymbol{pH} + \boldsymbol{pOH} = \boldsymbol{4} \quad \textbf{( 22 )}$$

En otras palabras, si conoces el pH de una solución, puedes calcular el pOH y viceversa.

## 4.3 Hidrólisis

La hidrólisis es un proceso químico en el cual una sustancia se descompone mediante la adición de agua. En química *ácido-base*, la hidrólisis se refiere a la reacción de una sal (un compuesto iónico) con agua, donde la sal se disocia en sus iones constituyentes y estos iones pueden

reaccionar con el agua para producir iones $H^+$ y $OH^-$. La hidrólisis de una sal puede dar como resultado una solución ácida, básica o neutra, dependiendo de las características *ácido-base* de los iones involucrados. Por ejemplo, si una sal contiene un catión ácido (un catión que puede donar protones, como $NH_4^+$) y un anión básico (un anión que puede aceptar protones, como $OH^-$), la solución resultante será básica. Por otro lado, si la sal contiene un catión básico (como $Na^+$) y un anión ácido (como $HSO_4^-$), la solución será ácida.

La hidrólisis es un concepto importante en la química y puede explicar por qué algunas sales en solución acuosa pueden ser ácidas o básicas. La comprensión de la hidrólisis es fundamental para el estudio de la química ácido-base y el equilibrio en sistemas acuosos.

## 4.4 Precipitados

En el estudio de la química, especialmente en el contexto de las soluciones acuosas, el fenómeno de la precipitación es fundamental. Un precipitado es un sólido que se forma en una solución líquida como resultado de una reacción química. Esta reacción generalmente implica la combinación de iones en solución que forman un compuesto insoluble, el cual se separa del líquido y se deposita como sólido.

La formación de un precipitado puede explicarse a través de la solubilidad de las sustancias. La solubilidad es una medida de la cantidad de una sustancia que puede disolverse en un solvente, como el agua, a una temperatura específica. Cuando las concentraciones de los iones en solución superan la solubilidad del producto formado, ocurre la precipitación.

Ejemplo de reacción de precipitación:

$$\boldsymbol{AgNO_3(aq) + NaCl(aq) \rightarrow AgCl(s) + NaNO_3(aq)} \qquad \textbf{( 23 )}$$

En esta reacción, el nitrato de plata ($AgNO_3$) y el cloruro de sodio (NaCl) son solubles en agua. Sin embargo, el cloruro de plata (AgCl) es insoluble y precipita como sólido.

El producto de solubilidad, $K_{sp}$ , es una constante que describe la solubilidad de un compuesto en solución. Para un compuesto genérico AB que se disocia en iones $A^+$ $B^-$, el $K_{sp}$ se define como:

$$\boldsymbol{K_{sp} = [A^+][B^-]} \qquad \textbf{( 24 )}$$

Si la concentración de los iones en solución supera este producto de solubilidad, se formará un precipitado.

### *Factores que afectan la precipitación*

***Concentración Iónica:*** La concentración de los iones en la solución es muy importante, al aumentar la concentración de los iones que forman el compuesto insoluble, se incrementa la probabilidad de formación de precipitado.

***pH:*** El pH de la solución puede afectar la solubilidad de ciertos compuestos. Por ejemplo, la solubilidad de hidróxidos metálicos generalmente disminuye a pH alto, facilitando la precipitación.

***Presencia de otros Iones:*** La presencia de otros iones en la solución puede influir en la formación de precipitados. Estos iones pueden formar complejos solubles con los iones que de otro modo formarían un precipitado.

***Temperatura:*** La temperatura también puede afectar la solubilidad. En muchos casos, la solubilidad de los sólidos aumenta con la temperatura, por lo que un aumento de temperatura puede disolver un precipitado.

## 5. FISICOQUÍMICA BÁSICA

La fisicoquímica básica representa un punto de encuentro entre la química y la física, donde se profundiza en los principios fundamentales que rigen las transformaciones de la materia y la energía. Esta disciplina se adentra en la química al desentrañar los aspectos termodinámicos y cinéticos de las reacciones químicas y al mismo tiempo, se conecta con la física al explorar los fenómenos de la energía, la termodinámica y las fuerzas intermoleculares que dan forma a la materia.

La fisicoquímica ofrece respuestas a preguntas como: ¿por qué ciertas reacciones químicas son espontáneas y otras no? ¿Cómo podemos prever la dirección de una reacción en función de la

energía? ¿Qué factores afectan la velocidad de una reacción química? ¿Cómo influyen la temperatura, la presión y la concentración en los equilibrios químicos?

## 5.1 Cinética Química

La cinética química se enfoca en el estudio de las velocidades de las reacciones químicas y los factores que las afectan, examina cómo cambian las concentraciones de los reactivos y productos con el tiempo y cómo se relacionan con la formación de productos. La cinética química se rige por la Ley de Velocidades, que establece que la velocidad de una reacción es proporcional al producto de las concentraciones de los reactivos, cada uno elevado a una potencia que refleja su coeficiente estequiométrico en la ecuación química balanceada. Factores como la temperatura, la concentración y la presencia de catalizadores pueden influir en la velocidad de una reacción. Esta rama de la química también se ocupa de conceptos como el estado de transición y la teoría de colisiones para comprender cómo las colisiones entre moléculas dan lugar a la formación de productos.

## 5.2 Equilibrio Dinámico

El equilibrio químico es un estado en el que las velocidades de la reacción directa e inversa se igualan, lo que resulta en concentraciones constantes de reactivos y productos con el tiempo. Aunque las moléculas continúan colisionando y reaccionando, no hay cambios netos en las cantidades de sustancias presentes. El equilibrio dinámico es crucial para muchas reacciones químicas y sistemas biológicos, desde la síntesis de amoníaco en la industria hasta procesos enzimáticos en las células.

El equilibrio químico está gobernado por la *Ley de Acción de Masas* y se expresa mediante una constante de equilibrio *(K),* que relaciona las concentraciones de reactivos y productos en una reacción química a una temperatura y presión dadas. La constante de equilibrio ofrece información sobre la posición del equilibrio: si *K* es mucho mayor que 1, los productos están favorecidos; si *K* es mucho menor que 1, los reactivos están favorecidos. El equilibrio químico es dinámico, lo que significa que las moléculas continúan reaccionando, pero a una velocidad constante.

La comprensión de la cinética química y el equilibrio dinámico es fundamental para optimizar procesos químicos, desde la producción industrial hasta la síntesis de compuestos farmacéuticos, y para comprender cómo los sistemas biológicos mantienen equilibrios delicados para realizar funciones vitales. Estos conceptos proporcionan una visión profunda de la forma en que las reacciones químicas funcionan y se mantienen en equilibrio en el mundo que nos rodea.

## 5.3 Influencia de la temperatura, presión y concentración en las reacciones químicas.

Las reacciones químicas son procesos dinámicos que pueden ser influenciados por una serie de factores externos, entre los que se destacan la temperatura, la presión y la concentración de los reactivos. Comprender cómo estos factores afectan el curso de las reacciones es importante en la química y la fisicoquímica, ya que permite controlar y optimizar una amplia gama de procesos químicos y biológicos.

### *Temperatura en las reacciones químicas*

La temperatura es un factor crítico en la cinética y la termodinámica de las reacciones químicas. Aumentar la temperatura de una reacción generalmente acelera la velocidad de la reacción al proporcionar más energía cinética a las moléculas, lo que aumenta la frecuencia de colisiones efectivas entre reactivos. Además, la temperatura afecta la constante de equilibrio *(K)* y, por lo tanto, la posición del equilibrio químico. En general, a temperaturas más altas, las reacciones endotérmicas (que absorben calor) son favorecidas, mientras que, a temperaturas más bajas, las reacciones exotérmicas (que liberan calor) son favorecidas.

### *Presión en las reacciones químicas*

La presión es especialmente relevante en reacciones que involucran gases. La Ley de *Boyle-Mariotte*, muestra que, un aumento en la presión, como por ejemplo en la síntesis de amoníaco, desplaza el equilibrio hacia el lado con un menor número de moles de gas, lo que favorece la formación de productos. La presión también afecta a las reacciones que involucran soluciones gaseosas o gases disueltos en líquidos, como la liberación de gases en bebidas carbonatadas.

### *Concentración en las reacciones químicas*

La concentración de los reactivos influye en la velocidad de la reacción. Aumentar la concentración de los reactivos generalmente aumenta la velocidad de la reacción al aumentar la frecuencia de colisiones efectivas. Esto se rige por la ley de velocidades, que establece que la velocidad de una reacción es proporcional al producto de las concentraciones de los reactivos, cada uno elevado a una potencia que refleja su coeficiente estequiométrico en la ecuación química balanceada. Reducir la concentración de un reactivo puede ralentizar o detener una reacción, mientras que aumentarla puede acelerarla.

La comprensión de cómo la temperatura, la presión y la concentración influyen en las reacciones químicas es esencial para la síntesis química, la ingeniería de procesos, la química farmacéutica y una variedad de aplicaciones industriales y biológicas. Al ajustar cuidadosamente estos factores, los científicos y los ingenieros pueden optimizar rendimientos, minimizar productos no deseados y lograr un control preciso sobre los procesos químicos. Estos conceptos son la base de la química y la fisicoquímica y permiten el diseño de reacciones químicas y procesos en condiciones óptimas.

## 6. FUNDAMENTOS DE LOS DIAGRAMAS DE EQUILIBRIO QUÍMICO

Un diagrama de equilibrio químico, también conocido como diagrama de equilibrio, diagrama de especies o diagrama de fases, es una representación gráfica que muestra cómo varían las concentraciones de las sustancias químicas en una reacción química en equilibrio en función de diferentes condiciones como el pH, la temperatura y la presión. Estos diagramas son herramientas poderosas para comprender, analizar, visualizar y predecir, cómo las reacciones químicas alcanzan un estado de equilibrio y cómo los cambios en las condiciones (temperatura, presión y concentración) afectan ese equilibrio.

En un diagrama de equilibrio químico, generalmente se representan las concentraciones de los reactivos y productos en los ejes X y Y, se trazan curvas que muestran cómo estas concentraciones cambian a medida que se alteran las condiciones.

El objetivo principal es proporcionar una representación visual de cómo una reacción química alcanza un punto en el cual las velocidades de la reacción directa e inversa son iguales, lo que significa que las concentraciones de las sustancias ya no cambian con el tiempo.

## 6.1 Tipos de diagramas de equilibrio químico

Los diagramas de equilibrio, también conocidos como diagramas de fases, son grandes herramientas en la metalurgia, la ciencia de materiales y la ingeniería, utilizadas para comprender y representar cómo los materiales se comportan en diferentes condiciones de temperatura y composición. Estos diagramas son vitales para predecir las propiedades y el rendimiento de los materiales en una amplia gama de aplicaciones industriales y científicas.

A continuación, se proporciona una descripción general de los tipos de diagramas de equilibrio:

### *Diagramas de equilibrio binarios*

Estos diagramas representan la relación entre dos componentes en un sistema. Por lo general, muestran cómo la temperatura y la composición afectan las fases presentes y sus proporciones. Un ejemplo bien conocido es el diagrama de fase hierro-carbono, que describe la transformación de diferentes fases del hierro en acero a diferentes temperaturas y concentraciones de carbono.

### *Diagramas de equilibrio ternarios*

Estos diagramas involucran tres componentes en un sistema. Son utilizados cuando se trabaja con aleaciones más complejas o sistemas químicos que involucran tres especies diferentes. Los diagramas ternarios representan las regiones de composición y temperatura donde se encuentran las diferentes fases.

### *Diagramas de equilibrio cuaternarios*

A medida que se agregan más componentes al sistema, los diagramas se vuelven más complejos. Los diagramas de equilibrio cuaternarios involucran cuatro componentes y son útiles en la investigación y desarrollo de materiales avanzados, como aleaciones de alta tecnología y materiales compuestos.

### *Diagramas de equilibrio de fase líquida-vapor*

Estos diagramas se utilizan específicamente para describir cómo las fases líquidas y gaseosas de un sistema se relacionan entre sí en función de la temperatura y la presión. Un ejemplo común es el diagrama de fase de agua, que muestra las condiciones en las que el agua puede estar en estado líquido, sólido o gaseoso.

### *Diagramas de equilibrio de fase sólida-líquida*

Estos diagramas se centran en las transiciones de fase entre las fases sólida y líquida de un material. Son básicos en la fundición de metales y la fabricación de materiales cerámicos, ya que proporcionan información sobre las temperaturas de fusión y solidificación.

### *Diagramas de equilibrio de fase sólida-sólida*

Estos diagramas se utilizan para representar las transiciones de fase entre diferentes fases sólidas en un sistema. Son valiosos en la metalurgia y la ciencia de materiales para comprender las transformaciones de fase en aleaciones y compuestos cristalinos.

### *Diagramas de equilibrio de fase líquida-líquida*

Estos diagramas describen las transiciones de fase entre diferentes líquidos inmiscibles en un sistema. Son relevantes en la química orgánica y la extracción de productos químicos a partir de mezclas líquidas.

### *Diagramas de equilibrio de fase sólida-gas*

Se utilizan para comprender las interacciones entre sólidos y gases en condiciones específicas de temperatura y presión, como la carburación de metales o la deposición de películas delgadas en la fabricación de dispositivos electrónicos.

En resumen, los diagramas de equilibrio son herramientas para comprender cómo los materiales se comportan en diferentes condiciones de temperatura, presión y composición. La elección del tipo de diagrama a utilizar depende de la naturaleza del sistema y los componentes involucrados.

## 6.2 Conceptos clave de un diagrama de equilibrio químico

El equilibrio químico es un concepto primordial en la química, describe la situación en la que las velocidades de las reacciones químicas directa e inversa son iguales, lo que resulta en que las concentraciones de los reactivos y productos permanezcan constantes en el tiempo. Entre los conceptos clave relacionados con el equilibrio químico se encuentran:

### *Ejes de coordenadas*

Un diagrama de equilibrio químico tiene ejes de coordenadas. Por lo general, las concentraciones de las sustancias involucradas en la reacción se representan en los ejes X y Y. Esto permite visualizar cómo cambian las concentraciones a medida que se ajustan las condiciones.

### *Línea de Equilibrio*

La característica más destacada del diagrama es la línea de equilibrio. Esta línea representa las condiciones (como temperatura y presión) en las cuales la reacción química alcanza un equilibrio. A lo largo de esta línea, las concentraciones de las sustancias reactivas y productos son constantes, lo que significa que las tasas de la reacción directa e inversa son iguales. En otras palabras, nada cambia con el tiempo en términos de concentración.

### *Constante de Equilibrio (K)*

La constante de equilibrio *K* es un valor numérico que se calcula a partir de las concentraciones de los productos y reactivos en el equilibrio. *K* es único para cada reacción química y refleja la relación entre estas concentraciones en ese punto específico del equilibrio. El valor de *K* es constante a una temperatura dada y se utiliza para predecir cómo se desplazará el equilibrio cuando se modifican las concentraciones iniciales de reactivos o productos.

### *Principio de Le Chatelier*

Este principio establece que, si se realiza un cambio en un sistema en equilibrio, el sistema ajustará sus condiciones para contrarrestar ese cambio y volver al equilibrio. Por ejemplo, si se incrementa la concentración de un reactivo, la reacción química se desplazará hacia la formación

de productos para contrarrestar el cambio. Imagina que estás equilibrando una balanza con diferentes pesos en cada lado, si pones más peso en un lado, la balanza se inclina hacia ese lado.

### *Equilibrio homogéneo y heterogéneo*

Un equilibrio químico es homogéneo si todas las sustancias involucradas se encuentran en la misma fase, por ejemplo, todos son gases o líquidos acuosos, mientras que es heterogéneo si involucra diferentes fases, por ejemplo, sólidos y líquidos.

## 6.3 Diagramas de equilibrio químico: Soluciones y precipitados

El equilibrio químico es esencial para comprender y predecir la formación de soluciones y precipitados en una variedad de situaciones, y su importancia radica en varios aspectos:

***Solubilidad y formación de soluciones:*** La solubilidad es la máxima cantidad de soluto que se puede disolver en un solvente a una temperatura y presión específicas. El equilibrio químico se aplica a las reacciones de disolución y precipitación y es importante para comprender cuándo una solución se vuelve saturada y no puede disolver más soluto. Por ejemplo, en una solución saturada, la velocidad de disolución del soluto es igual a la velocidad de precipitación, lo que mantiene constante la concentración del soluto.

***Precipitación y eliminación de impurezas:*** Comprender el equilibrio químico es destacado para la precipitación de sustancias no deseadas en soluciones. Al agregar un reactivo apropiado, puedes inducir la formación de un precipitado que se puede separar de la solución, lo que es valioso en procesos de purificación química.

***Control de la concentración:*** El equilibrio químico te permite controlar las concentraciones de diferentes especies químicas en una solución. A través de cálculos basados en la constante de equilibrio, puedes ajustar las condiciones de una reacción para obtener la concentración deseada de productos o reactivos.

***Indicadores y pH:*** El equilibrio químico también está relacionado con la acidez y alcalinidad de las soluciones. La concentración de iones hidronio ($H_3O^+$) e hidroxilo ($OH^-$) en una solución acuosa está determinada por el equilibrio químico del agua y esto influye en el pH de la solución.

## 6.4 Aplicaciones generales de los Diagramas de Equilibrio Químico

Los diagramas de equilibrio químico tienen una amplia gama de aplicaciones en la química y la ingeniería química:

***Diseño de Procesos Químicos*:** Son esenciales para el diseño de procesos industriales y químicos. Permiten identificar las condiciones óptimas para maximizar la producción de productos deseados o minimizar la formación de subproductos no deseados.

***Purificación de Sustancias:*** Ayudan a comprender cómo purificar sustancias químicas al forzar la precipitación de impurezas o separar componentes de una mezcla.

***Control de Reacciones:*** Facilitan el control de reacciones químicas al ajustar las condiciones para obtener las concentraciones deseadas de reactivos y productos.

***Comprender Sistemas Complejos:*** Son valiosos para comprender sistemas químicos complejos, como las reacciones ácido-base, la formación de sales o la interacción entre especies químicas en solución.

En resumen, un diagrama de equilibrio químico es una herramienta gráfica que muestra cómo cambian las concentraciones de sustancias en una reacción química en equilibrio en función de las condiciones externas. Estos diagramas son basicos para la planificación, el diseño y el control de procesos químicos, así como para comprender sistemas químicos complejos. Proporcionan información valiosa para los químicos e ingenieros que trabajan en una amplia gama de campos, desde la investigación hasta la producción industrial.

## 6.5 Efecto de la Temperatura en el Equilibrio Químico

Las variables clave en los diagramas de equilibrio químico son la temperatura (T), la presión (P), la concentración y el pH. La temperatura afecta la constante de equilibrio y por ende, la posición del equilibrio. La presión es importante en reacciones que involucran gases, ya que un cambio en la presión puede desplazar el equilibrio según el principio de Le Chatelier. La concentración de los reactivos y productos también influye en la posición del equilibrio, ya que un aumento en la

concentración de uno de los reactivos o productos puede provocar un desplazamiento del equilibrio hacia la formación de más productos o reactivos, respectivamente. Finalmente, el pH es relevante en reacciones que implican ácidos o bases, ya que puede alterar la distribución de los compuestos en equilibrio, especialmente en reacciones que dependen de la ionización de sustancias.

## *Reacciones Endotérmicas*

Para las reacciones endotérmicas, donde el calor es absorbido por el sistema (ΔH>0), un aumento de la temperatura favorece la formación de productos. Esto se debe a que el sistema absorbe el calor adicional para formar más productos.

Ejemplo: En el caso de la disociación del carbonato de calcio, la reacción es endotérmica, lo que significa que absorbe calor del entorno:

$$\boldsymbol{CaCO_{3(s)} \leftrightarrow CaO_{(s)} + CO_{2(g)}} \qquad \textbf{( 25 )}$$

Dado que esta reacción es endotérmica, absorber calor favorece la formación de productos (CaO y $CO_2$). Por lo tanto, a temperaturas más altas, el equilibrio se desplaza hacia la derecha, promoviendo la descomposición del carbonato de calcio en óxido de calcio (CaO) y dióxido de carbono ($CO_2$).

## *Reacciones Exotérmicas*

Para las reacciones exotérmicas, donde el calor es liberado (ΔH<0), un aumento de la temperatura favorece la formación de reactivos. Esto se debe a que el sistema libera el calor adicional, desplazando el equilibrio hacia los reactivos.

Ejemplo: En la síntesis del amoníaco

$$\boldsymbol{N_{2(g)} + 3H_{2(g)} \leftrightarrow 2NH_{3(g)} + calor} \qquad \textbf{( 26 )}$$

Contrariamente a las reacciones endotérmicas, a temperaturas más bajas, el equilibrio se desplaza hacia la derecha, produciendo más $NH_3$.

# 7. GENERACIÓN DE DIAGRAMAS DE EQUILIBRIO: PH VS FRACCIÓN DE ESPECIE FORMADA

Los diagramas de equilibrio pH vs. fracción de especie formada son herramientas visuales en la química y la bioquímica que nos permiten comprender cómo la acidez o alcalinidad (pH) afecta la formación y distribución de especies químicas en una solución. Estos diagramas ofrecen una ventana única a las transformaciones químicas y cómo cambian en función del pH.

Imaginemos un mundo microscópico donde moléculas y iones interactúan constantemente, algunas de estas especies químicas pueden reaccionar entre sí y formar otras, mientras que otras pueden disociarse en soluciones ácidas o básicas. Los diagramas de equilibrio pH vs. fracción de especie formada nos permiten trazar este complejo panorama químico y visualizar cómo las diferentes especies químicas cambian en concentración a medida que alteramos el pH de la solución.

Estos diagramas son particularmente relevantes en la química ácido-base, la bioquímica y la química de coordinación, donde comprender cómo diferentes iones y moléculas responden a cambios en el pH es esencial. Los diagramas de equilibrio pH vs. fracción de especie formada nos ofrecen información valiosa para predecir la reactividad de sustancias, diseñar reacciones químicas y comprender procesos biológicos, como la disociación de proteínas o la absorción de medicamentos en el cuerpo.

En esta exploración de los diagramas de equilibrio pH, se descubrirá cómo construirlos, interpretarlos y utilizarlos como herramientas en la química, para comprender y controlar las transformaciones químicas en un amplio espectro de aplicaciones. A través de estos diagramas, se comprenderá cómo el pH puede ser una llave maestra para manipular y comprender el comportamiento de las especies químicas en solución, lo que es esencial en la investigación científica, la química industrial y la atención médica.

## 7.1 Descripción de cómo se construyen los diagramas de equilibrio: pH vs fracción de especie formada.

La generación de diagramas de equilibrio pH vs. fracción de especie formada es una gran herramienta en la química y la bioquímica para comprender cómo las especies químicas interactúan en soluciones y cómo estas interacciones cambian en función del pH.

Este proceso requiere una serie de pasos detallados:

1. ***Definición del sistema químico*:** El primer paso es definir claramente el sistema químico que se va a analizar. Esto implica identificar todas las especies químicas presentes en la solución y comprender sus interacciones. Por ejemplo, en el caso de un ácido débil, como el ácido acético ($CH_3COOH$), el sistema incluiría el ácido, su base conjugada ($CH_3COO^-$), y cualquier otra especie química relacionada con las reacciones ácido-base.
2. **Escritura de ecuaciones químicas relevantes:** Se deben escribir las ecuaciones químicas que describen las reacciones ácido-base y las transformaciones de las especies químicas presentes. Por ejemplo, para el ácido acético, escribiríamos la ecuación que muestra su disociación parcial en iones de hidrógeno ($H^+$) y acetato ($CH_3COO^-$).
3. **Determinación de las concentraciones iniciales:** Es esencial conocer las concentraciones iniciales de todas las especies químicas en la solución. Estas concentraciones pueden ser proporcionadas por datos experimentales o calculadas en función de la cantidad de sustancias químicas agregadas a la solución.
4. **Aplicación de la ley de acción de masas:** La Ley de Acción de Masas se utiliza para expresar la relación entre las concentraciones de reactivos y productos en las ecuaciones químicas. Esto permite calcular las constantes de equilibrio (K) para cada reacción química y determinar cómo cambian las concentraciones de las especies químicas a medida que la reacción alcanza el equilibrio.
5. **Cálculo de la fracción de especie formada:** A partir de las ecuaciones químicas y las constantes de equilibrio (K), se calcula la fracción de especie formada en función del pH. Esto implica determinar cuánta de una especie química específica se encuentra en forma disociada o en forma no disociada a un pH determinado.

6. **Construcción gráfica del diagrama:** Con la fracción de especie formada calculada en función del pH, se construye el diagrama pH vs. fracción de especie formada. En este gráfico, el eje horizontal representa el pH, mientras que el eje vertical representa la fracción de especie formada. Las curvas en el diagrama representarán cómo cambia la fracción de especie formada a medida que ajustamos el pH de la solución.
7. **Interpretación del diagrama:** Una vez que el diagrama está construido, se puede interpretar. Es posible identificar puntos de inflexión en el gráfico, lo que indica regiones donde la especie química predominante cambia. Además, se puede determinar cuál será la especie química dominante en una solución a un pH específico, lo que es esencial para comprender la química ácido-base y la reactividad de las sustancias en diferentes condiciones.

Estos diagramas proporcionan una visión detallada de cómo las especies químicas se comportan en función del pH. En resumen, la generación de diagramas de equilibrio pH vs. fracción de especie formada implica definir el sistema, escribir ecuaciones químicas, calcular constantes de equilibrio, determinar fracciones de especie formada y representar estos resultados gráficamente para comprender y predecir el comportamiento de las sustancias en solución.

## 7.2 Cálculo de fracciones de especies químicas en función del pH y la concentración

Los cálculos de fracciones de especies químicas en función del pH y la concentración son un aspecto de la química ácido-base, que nos permite comprender cómo las especies químicas se comportan en solución, cómo reaccionan ante cambios en el pH y cómo estas reacciones influyen en diversos procesos químicos y biológicos.

*Equilibrio Ácido-Base:* La química ácido-base se basa en la noción de equilibrio, donde las especies químicas pueden existir en múltiples formas dependiendo de su entorno. Un ácido es una sustancia que dona protones (iones de hidrógeno, $H^+$), mientras que una base acepta protones. A menudo, las especies químicas pueden actuar tanto como ácidos como bases, y esto depende del pH de la solución.

*Constante de Equilibrio Ácido-Base (K):* En agua pura, existe un equilibrio importante entre iones hidronio ($H_3O^+$) e iones hidroxilo ($OH^-$). Esto se describe mediante la constante de equilibrio del agua, Kw. A una temperatura determinada, Kw tiene un valor constante que es igual a $1.0 \times 10^{-14}$ $M^2$. Para soluciones ácidas o básicas, el equilibrio entre $H_3O^+$ y $OH^-$ se desplaza, afectando el pH.

*pH y pOH:* El pH es una medida que indica la acidez o alcalinidad de una solución y se calcula mediante la concentración de iones de hidronio ($H_3O^+$). El pOH es la medida equivalente para la concentración de iones hidroxilo ($OH^-$). Estas dos magnitudes están relacionadas por la ecuación pH + pOH = 14. Cambios en el pH y el pOH afectan la distribución de especies químicas.

*Cálculos de Fracciones de Especies Químicas:* Para calcular las fracciones de especies químicas en función del pH y la concentración, se utilizan ecuaciones y constantes de equilibrio específicas para cada reacción ácido-base. Por ejemplo, para el equilibrio de un ácido débil (HA) y su base conjugada ($A^-$), se utiliza la ecuación Henderson-Hasselbalch: $pH = pKa \log([A^-]/[HA])$, donde pKa es la constante de equilibrio ácido-base del ácido débil. Esta ecuación permite determinar la fracción de la base conjugada ($A^-$) en función del pH y las concentraciones iniciales.

*Ejemplos de Aplicación:* Estos cálculos son importantes en la química analítica, la bioquímica y la farmacología. Por ejemplo, en farmacología, se utilizan para predecir cómo los fármacos se comportarán en el cuerpo a diferentes pH y concentraciones. En la bioquímica, son esenciales para comprender las propiedades de las proteínas y su carga neta en solución.

Los cálculos de fracciones de especies químicas en función del pH y la concentración son una herramienta esencial para comprender y predecir el comportamiento de las especies químicas en solución y cómo reaccionan en entornos ácidos y básicos.

# 8. DIAGRAMAS DE EQUILIBRIO QUÍMICO: SOFTWARE HYDRA-MEDUSA

## 8.1 Descripción del software HYDRA-MEDUSA

Los diagramas de equilibrio químico son una gran herramienta en la química para visualizar, comprender e interpretar cómo las especies químicas se comportan en soluciones en función de diversos parámetros, como el pH y la concentración. Estos diagramas son especialmente útiles en el contexto de reacciones ácido-base, complejación, precipitación y otros equilibrios químicos.

HYDRA-MEDUSA es un software especializado que ha revolucionado la forma en que los científicos y químicos pueden diseñar, analizar y representar diagramas de equilibrio químico. Este software combina una interfaz amigable con una potente capacidad de cálculo, lo que lo convierte en una herramienta esencial para investigadores, estudiantes y profesionales en el campo de la química y la bioquímica. El uso de HYDRA-MEDUSA simplifica la tarea de construir diagramas de equilibrio químico, lo que permite explorar y predecir el comportamiento de las especies químicas en solución bajo una variedad de condiciones a presión atmosférica constante y a una temperatura de 25 °C. Con la capacidad de ingresar constantes de equilibrio y datos experimentales, el software genera gráficos detallados que representan visualmente cómo cambian las fracciones de especies químicas en función de los parámetros seleccionados.

El software tiene una base de datos con resultados obtenidos de los análisis fisicoquímicos y de laboratorio para alimentar el paquete computacional denominado "MEDUSA" *(Make Equilibrium Diagrams Using Sophisticated Algorithms).* Este programa permite generar varios tipos de diagramas, como los de zonas de existencia y predominio, logarítmicos, fracción, solubilidad logarítmica, actividades relativas y cálculos de pH. MEDUSA contiene una base de datos con información de constantes termodinámicas y de solubilidad de las posibles especies químicas que se pueden formar. El programa auxiliar HYDRA es el encargado de acceder a esta base de datos y alimentar el programa MEDUSA con los datos hidroquímicos resultantes *(Puigdomenech, 1998).*

Gracias a esta integración de software y bases de datos, los diagramas de equilibrio químico creados mediante HYDRA-MEDUSA permiten un análisis detallado y predictivo del

comportamiento de soluciones químicas, facilitando estudios tanto teóricos como experimentales.

## 8.2 Instalación y configuración básica del software HYDRA-MEDUSA

A continuación, se presenta un enlace que permite acceder a la página oficial de la universidad KTH cuyas siglas se refieren al Kungliga Tekniska högskolan, que en español significa Real Instituto de Tecnología. Es una de las universidades más destacadas de Suecia en el campo de la tecnología y la ingeniería, ubicada en Estocolmo, en donde se encuentra disponible de manera gratuita el programa HYDRA-MEDUSA para su instalación y uso.

Downloads | KTH

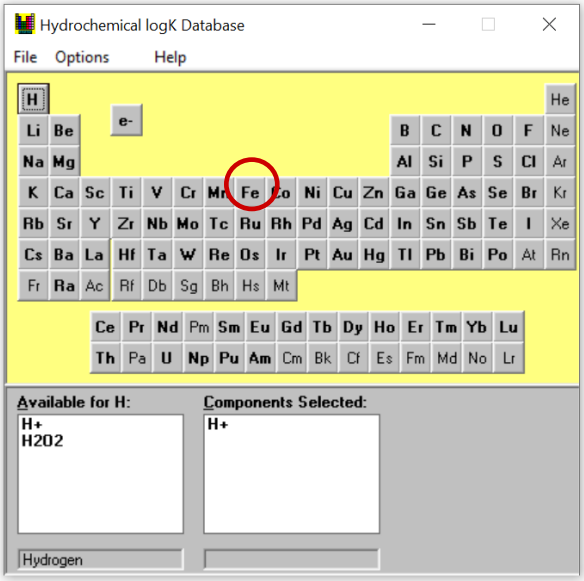
## 8.3 Guía inicial para la generación de diagramas de equilibrio químico software HYDRA-MEDUSA

En esta sección, se dará pie a cómo construir diagramas de equilibrio químico utilizando el software HYDRA-MEDUSA. Como ejemplo práctico, se analizarán las diferentes especies químicas que pueden formarse a partir del hierro (Fe) en diversas condiciones.

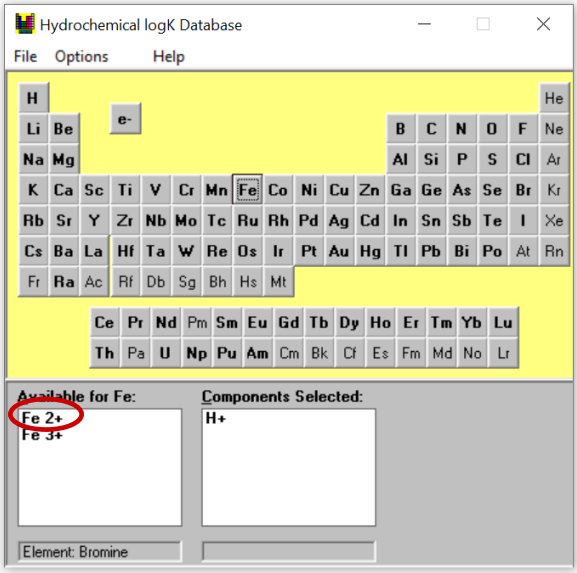
**Nota**: Para facilitar la comprensión de los pasos, las especies iónicas se presentan en el texto de la misma forma en que aparecen en los cuadros de diálogo del software. Por ejemplo, en lugar de escribir $Fe^{2+}$ o $H^{+}$, como es lo correcto, se utiliza la notación exacta: Fe2+ o H+.

Pasos a seguir:

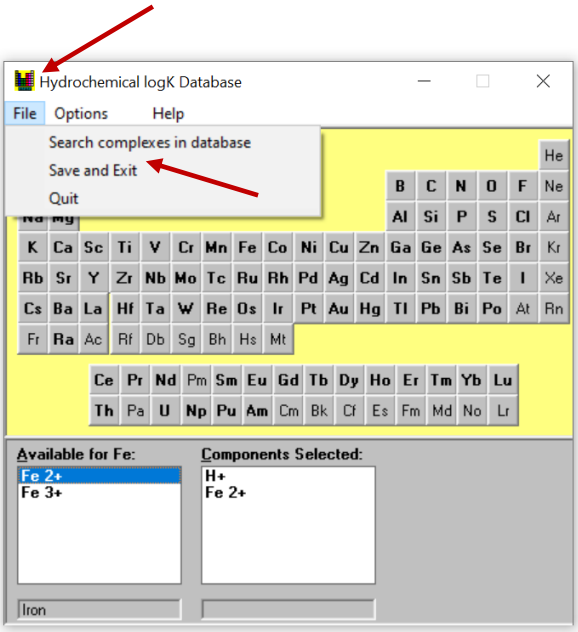
1. Inicie HYDRA y haga clic en "Fe" en la tabla periódica.



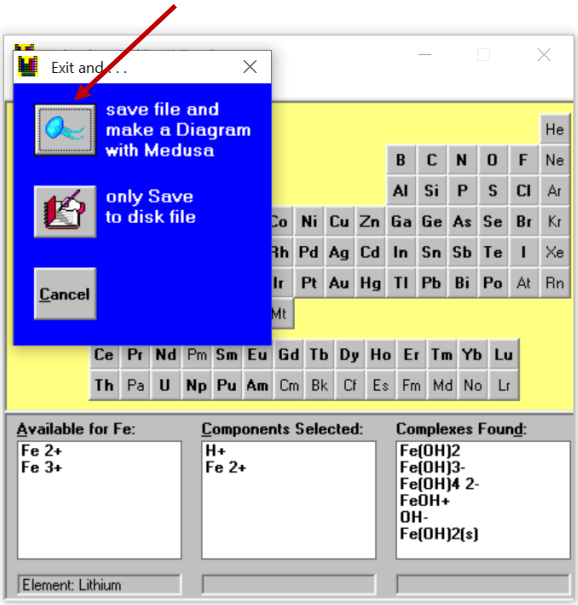

2. Haga clic en "Fe 2+" en la lista de componentes disponibles. Tanto "H+" como "Fe 2+" aparecerán en la lista de componentes seleccionados.



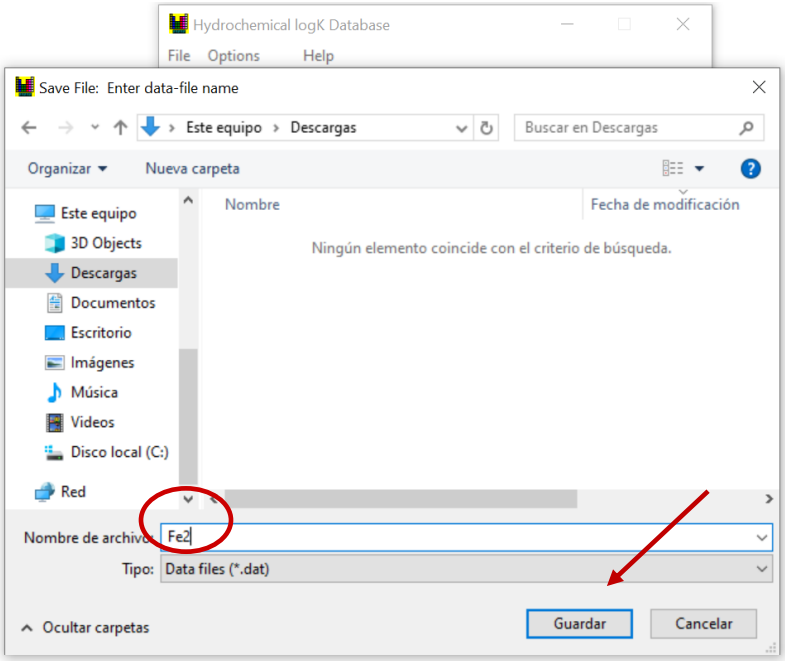
3. Haga clic en el menú desplegable "File / Save and Exit".



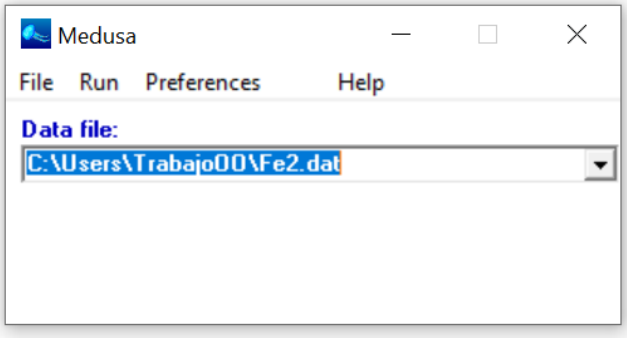

4. De Clic en el botón “MEDUSA” para hacer un diagrama.



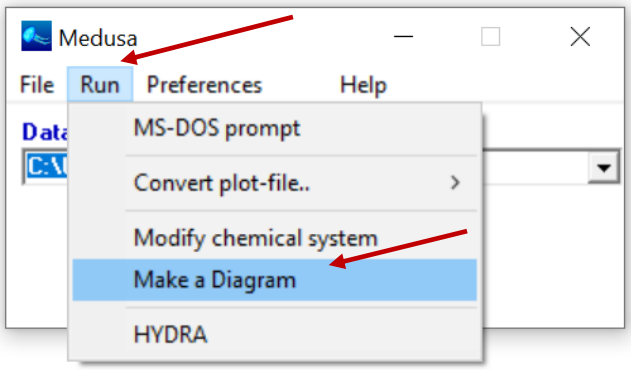
5. Introduzca un nombre de archivo, por ejemplo "Fe2+" y guarde el archivo.



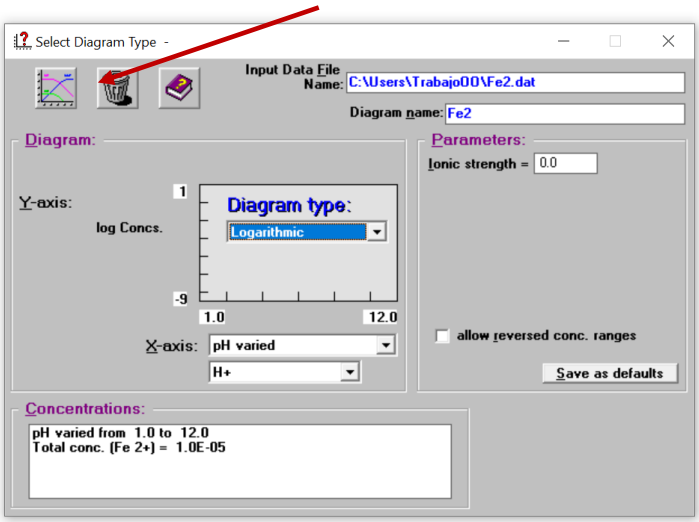

6. Aparecerá la ventana principal de MEDUSA.



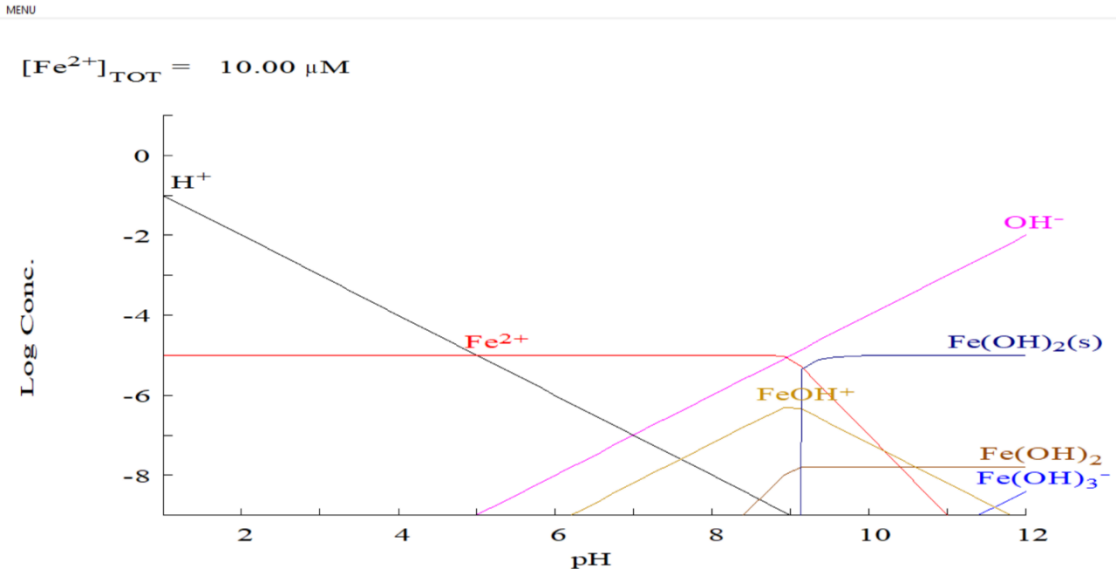
7. Haga clic en el menú desplegable "Run/Make a Diagram".




8. Aparecerá una nueva ventana para seleccionar qué tipo de diagrama desea. Haga clic en el botón “Diagram” en la esquina superior izquierda de la ventana.



9. Los cálculos serán realizados por el programa. Cuando los cálculos hayan terminado, el diagrama será mostrado en una ventana.




Se pueden observar que la simulación de especies de Fe son principalmente hidróxidos, a pH menores de 7 se obtiene una mayor presencia de iones $Fe^{2+}$ esto permite determinar el intervalo de trabajo para el pH según las especies que se busquen obtener.

Es importante mencionar que, para este caso, el Fe indica que se ioniza en formas de iones $Fe^{2+}$ y $Fe^{3+}$, por lo que, para hacer un análisis completo, es necesario realizarlo con ambos iones.

# 9. INTERPRETACIÓN GENERAL DE LOS DIAGRAMAS DE EQUILIBRIO QUÍMICOS: SOFTWARE HYDRA-MEDUSA

## 9.1 Consideraciones generales para la interpretación

En esta sección, se proporcionará una explicación general sobre cómo interpretar un diagrama de equilibrio químico generado por el programa Medusa.

Es importante destacar que cada una de las líneas trazadas en el diagrama se representa con un color diferente, correspondiendo cada línea a una especie química específica. Estas especies pueden categorizarse como se indicó anteriormente: los aniones (-) y los cationes (+) se presentan

como superíndices, mientras que las especies que tienden a formar partículas sólidas visibles al ojo humano se muestran como subíndices entre paréntesis, incluyendo sólidos cristalinos (s), sólidos amorfos (am) y cristales (Cr).

Además, hay que tener en cuenta que cualquier punto dentro del área del diagrama puede ser localizado mediante coordenadas (x, y), mediante un clic sobre el área deseada. Por consiguiente, dicho punto nos proporciona las condiciones experimentales necesarias para obtener la especie química representada en el diagrama.

Es también importante destacar que, a valores de pH muy ácidos, los metales se encontrarán predominantemente en forma de cationes, mientras que, a valores de pH muy alcalinos, los metales formarán principalmente óxidos y/o hidróxidos.

## 9.2 Diagramas de predominancia de área (Predominance Area)

De acuerdo a su definición, estos diagramas, que representan las coordenadas del logaritmo de la concentración de la especie frente al pH, nos indican claramente las áreas donde una especie predomina de manera exclusiva, por lo tanto, nos permiten identificar las condiciones experimentales en las que esa especie particular se presenta.

Es importante destacar que cada línea en el diagrama representa una reacción química específica en la que una especie se convierte en otra debido a cambios en el pH o en la concentración de la especie. Estas reacciones pueden ser procesos de disociación, formación de complejos, precipitación, entre otros fenómenos químicos.

## 9.3 Diagramas de pH – Fracción (Fraction)

Estos diagramas proporcionan información sobre la fracción de cada especie en relación con valores específicos de pH. Por ejemplo, una línea horizontal que comienza en 1 en fracción indica que esa especie está presente al 100% en esos valores de pH. Sin embargo, un cambio en la pendiente de la línea sugiere la formación de una nueva especie, como se refleja en el diagrama para ese pH particular.

Es importante destacar que la suma de las fracciones de todas las especies debe ser igual a uno. Por lo tanto, cuando coexisten más de dos especies a un valor de pH, la suma de sus fracciones también es igual a uno. Esto nos permite obtener la fracción de todas las especies presentes en la solución en ese pH específico.

## 9.4 Diagramas de Logaritmo–pH (Logarithmic)

Los diagramas de especiación logarítmica son herramientas visuales que se utilizan para representar cómo varían las concentraciones de diferentes especies químicas en función del pH en una solución. Son especialmente útiles en la química de soluciones, en particular en el estudio de equilibrios ácido-base, equilibrios de complejos metálicos, y solubilidad de compuestos.

La interpretación de la escala logarítmica en estos diagramas implica comprender cómo cambia la concentración de las especies químicas con el pH. Por ejemplo, si observamos un cambio abrupto en la pendiente de una línea en el diagrama mientras nos movemos a lo largo del eje del pH, esto podría indicar un cambio significativo en la especiación de un elemento en la solución.

Además, la escala logarítmica nos permite visualizar de manera más clara todas las relaciones entre las diferentes formas químicas presentes en la solución en un rango más amplio de condiciones. Esto nos ayuda a comprender mejor cómo varía la especiación de un elemento o compuesto en respuesta a cambios en el pH y la concentración en la solución.

### *Ejes del diagrama logarítmico*

**Eje X (horizontal):** Representa el pH, que varía normalmente de 0 (muy ácido) a 14 (muy básico).

**Eje Y (vertical):** Representa el logaritmo de la concentración de las especies presentes en la solución. Cuando se observan números negativos en el eje Y, se interpreta como valores de concentración muy pequeños en una escala logarítmica (por ejemplo, un valor de -4 corresponde a una concentración de $10^{-4} = 0.0001$.

### *Curvas en el diagrama logarítmico*

**Curvas:** Cada curva en el diagrama representa una especie química particular y muestra cómo cambia su concentración con el pH.

**Especies predominantes:** Las curvas más altas en cualquier punto del eje X indican la especie que es predominante a ese pH específico.

**Puntos de cruce:** Son los puntos donde dos curvas se interceptan, lo que indica que las concentraciones de las dos especies involucradas son iguales en ese pH particular.

Si no hay una línea en una zona del diagrama, la especie correspondiente tiene una concentración tan baja que es prácticamente inexistente o insignificante en esa zona de pH. Los diagramas de especiación logarítmicos suelen enfocarse en las especies que son relevantes o predominantes a diferentes valores de pH.

En las zonas donde solo hay una curva, esa especie es la predominante, lo que significa que las otras especies están presentes en concentraciones muy bajas (por eso no ves sus curvas).

## 9.5 Interpretación de reacciones químicas

Las reacciones químicas en los diagramas de equilibrio químico son la reacción que existe entre la especie seleccionada y el agua, variando el potencial de hidrógeno. En otras palabras, se trata de analizar el efecto que existe entre la especie seleccionada y la adición de protones (H+) o hidroxilos (OH-), por ejemplo:

***Disociación de ácido acético ($CH_3COOH$):***

$$CH_3COOH_{(aq)} \rightleftharpoons CH_3COO^-{}_{(aq)} + H^+ \qquad (27)$$

En esta reacción, la adición de protones ($H^+$) desde el agua disocia el ácido acético en su anión acetato ($CH_3COO^-$) y en iones hidronio ($H_3O^+$), aumentando la concentración de estos últimos conforme se incrementa el potencial de hidrógeno (pH).

***Formación de hidróxido de hierro (III) ($Fe(OH)_3$):***

$$Fe^{3+} + 3OH^{-} \rightleftharpoons Fe(OH)_3 \quad (28)$$

Aquí, la adición de hidroxilos ($OH^-$) desde una base disuelve iones de $Fe^{3+}$ para formar el precipitado de hidróxido de hierro III ($Fe(OH)_3$) conforme se incrementa el pH.

***Disociación del carbonato de calcio ($CaCO_3$):***

$$CaCO_3 + H_2O + C2O_2 \rightleftharpoons Ca_2 + +2HCO_3^{-} \quad (29)$$

La adición de protones ($H^+$) y la disolución de dióxido de carbono ($CO_2$) en agua promueven la disociación del carbonato de calcio en iones calcio ($Ca^{2+}$) y bicarbonato ($HCO_3^-$), incrementando la concentración de estas especies a medida que aumenta el pH.

# 10. IDENTIFICACIÓN DE FASES Y COMPOSICIONES EN EL EQUILIBRIO.

En el estudio de los diagramas de equilibrio químico generados por el software HYDRA-MEDUSA, la identificación precisa de las fases y composiciones presentes en un sistema es fundamental. Los diagramas de equilibrio proporcionan una representación visual de cómo las especies químicas se distribuyen en función de variables como el pH, la temperatura y la concentración. Esta sección explora las herramientas y técnicas más eficaces para interpretar estos diagramas, así como los errores comunes que se deben evitar para asegurar una correcta interpretación.

## 10.1 Herramientas y técnicas para la interpretación eficiente

El software HYDRA-MEDUSA es una herramienta poderosa para la elaboración y análisis de diagramas de equilibrio químico. Para interpretar estos diagramas de manera eficiente, es esencial dominar las herramientas y técnicas que ofrece el software.

***Interfaz de Usuario de HYDRA-MEDUSA:*** El software proporciona una interfaz amigable que permite la entrada detallada de datos sobre los compuestos y condiciones experimentales. Los usuarios pueden especificar concentraciones, pH, temperatura y otras variables relevantes.

***Generación de diagramas de pH vs. fracción de especie:*** Una de las capacidades clave de HYDRA-MEDUSA es la generación de diagramas que muestran la fracción de diferentes especies en función del pH. Estos diagramas ayudan a visualizar en qué condiciones de pH predominan ciertos iones o precipitados. Por ejemplo, para un compuesto como el nitrato de zinc, el software puede mostrar que a pH ácidos predominan los iones de zinc, mientras que a pH alcalinos se forma óxido de zinc.

***Simulaciones de especiación:*** HYDRA-MEDUSA permite realizar simulaciones detalladas de especiación química, donde se puede ver la distribución de diferentes especies iónicas y moleculares en función de las condiciones de entrada. Estas simulaciones son importantes para entender cómo las condiciones afectan el equilibrio químico.

***Análisis de Diagramas de Pourbaix:*** Aunque más comúnmente utilizados en electroquímica, los diagramas de Pourbaix (potencial vs. pH) generados por HYDRA-MEDUSA pueden dar información valiosa sobre la estabilidad de diferentes especies en soluciones acuosas, ayudando a predecir condiciones de corrosión o precipitación.

***Uso de datos termodinámicos:*** El software integra bases de datos termodinámicas extensas que contienen información sobre constantes de equilibrio, entalpías y entropías de diversas reacciones. Esto permite una modelización precisa de los sistemas químicos bajo estudio.

***Visualización gráfica:*** HYDRA-MEDUSA proporciona opciones avanzadas para la visualización gráfica de los resultados, facilitando la interpretación de los datos. Los usuarios pueden generar gráficos personalizados que resalten las especies de interés bajo diferentes condiciones.

## 10.2 Errores comunes en la interpretación de diagramas químicos

A pesar de las potentes capacidades del software HYDRA-MEDUSA, la interpretación de los diagramas de equilibrio químico puede estar sujeta a errores si no se manejan correctamente los datos y las herramientas. A continuación, se describen algunos errores comunes y cómo evitarlos:

***Errores en la entrada de datos:*** Un error común es la introducción incorrecta de datos en el software. Datos erróneos de concentraciones mal calculadas, pueden generar resultados inexactos. Es importante verificar y validar los cálculos antes de realizar simulaciones.

***Malinterpretación de los resultados:*** Los diagramas de equilibrio pueden ser complejos y su interpretación puede no ser directa. Es importante comprender plenamente lo que representa cada eje y cada curva de las especies químicas en los diagramas generados. Por ejemplo, la confusión entre la fracción molar de una especie y su concentración absoluta puede llevar a conclusiones incorrectas.

***Ignorar la dependencia que la temperatura es constante:*** Muchas veces, los usuarios pueden olvidar que los diagramas generados son válidos solo para temperatura constante de 25°C. La constante de equilibrio varía con la temperatura, y no considerar esto puede resultar en interpretaciones incorrectas del equilibrio químico.

***Dependencia exclusiva del software:*** Aunque HYDRA-MEDUSA es una herramienta avanzada, depender exclusivamente del software sin una comprensión teórica de los principios subyacentes puede ser problemático. Validar las predicciones del software con datos experimentales y teorías químicas es fundamental para asegurar su precisión.

***Simplificaciones excesivas:*** Al modelar sistemas químicos complejos, es tentador simplificar demasiado para facilitar el análisis. Sin embargo, omitir interacciones importantes entre especies o suposiciones incorrectas sobre la ausencia de ciertos iones puede resultar en interpretaciones erróneas.

***No considerar todos los estados de ionización de los elementos:*** Es importante no omitir los diferentes estados de ionización de los elementos al realizar un diagrama de equilibrio, especialmente cuando un compuesto puede existir en dos o más estados de valencia. Cada estado de valencia puede comportarse de manera distinta en términos de reactividad y de formación de productos, por lo que omitir algunos de estos estados puede llevar a conclusiones incorrectas o incompletas sobre el comportamiento del compuesto en una reacción.

Cuando un elemento presenta varios estados de valencia, es importante construir un diagrama para cada estado de valencia por separado. Esto no solo permite obtener una representación más precisa del sistema, sino que también ayuda a identificar cómo varían las propiedades del compuesto (como la solubilidad o la estabilidad) en función del estado de oxidación. Además, estos diagramas separados pueden proporcionar un panorama más completo del sistema, mostrando cómo cada estado de valencia puede influir en el equilibrio de la reacción y en la distribución de las especies producidas.

***No considerar las interacciones complejas:*** En sistemas multicomponente, las interacciones entre diferentes iones y moléculas pueden ser complejas. Ignorar estas interacciones o no incluirlas adecuadamente en el modelo puede llevar a resultados incorrectos.

La identificación de fases y composiciones en el equilibrio químico es esencial para el entendimiento profundo de los sistemas químicos. El software HYDRA-MEDUSA ofrece herramientas avanzadas para la elaboración y análisis de diagramas de equilibrio, facilitando la interpretación de los mismos. Sin embargo, es crucial utilizar estas herramientas correctamente y ser consciente de los errores comunes en la interpretación para asegurar resultados precisos y útiles. Esto no solo facilita la planificación y ejecución de experimentos, sino que también optimiza procesos industriales y de investigación, ahorrando tiempo y recursos.

# Metodología

# 1. SELECCIÓN DEL SISTEMA QUÍMICO A ESTUDIAR

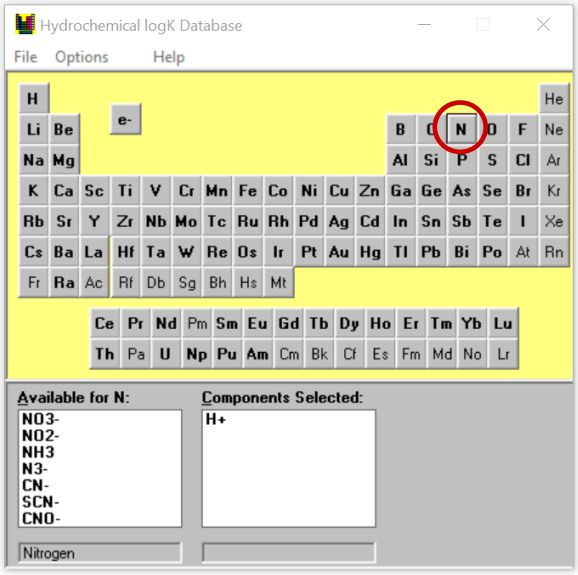
Se optó por enfocarse en compuestos de sales debido a su capacidad para disolverse en agua rápidamente a una temperatura de 25°C, esta decisión se tomó considerando que el software HYDRA-MEDUSA solo trabaja con reactivos completamente disueltos en solución y a la temperatura referida, también se requiere que preferencialmente los mismos, sean de alta pureza. Se hizo una revisión de las sales disponibles, explorando opciones como cloruros, nitratos y sulfatos, después de este análisis, se seleccionó el nitrato de zinc hexahidratado ($Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$), el nitrato de níquel ($Ni(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$), y el nitrato de aluminio ($Al(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$), todos con una pureza del 100%. Como se mencionó en el apartado 1.15 del Marco Teórico "Disolución de sales, ácidos y bases comunes en agua", el nitrato de zinc se disocia en iones $Zn^{2+}$ y en el ion nitrato $NO_3^-$, lo mismo ocurre para los nitratos de níquel y de aluminio.

# 2. CASO NITRATO DE ZINC HEXAHIDRATADO $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$

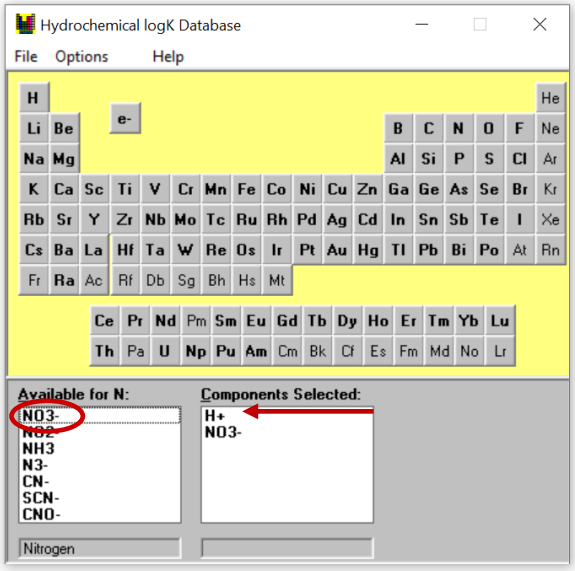
## 2.1 Fase inicial de la generación de diagramas de equilibrio caso nitrato de zinc

**Nota**: Recordemos que en lugar de escribir $Fe^{2+}$ o $H^+$, se utiliza la notación exacta: Fe2+ o H+.

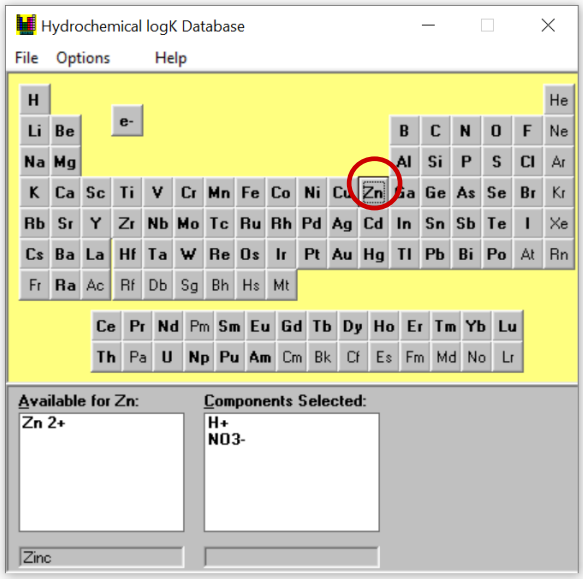
1. Inicie HYDRA y haga clic en el elemento nitrógeno N en la tabla periódica.



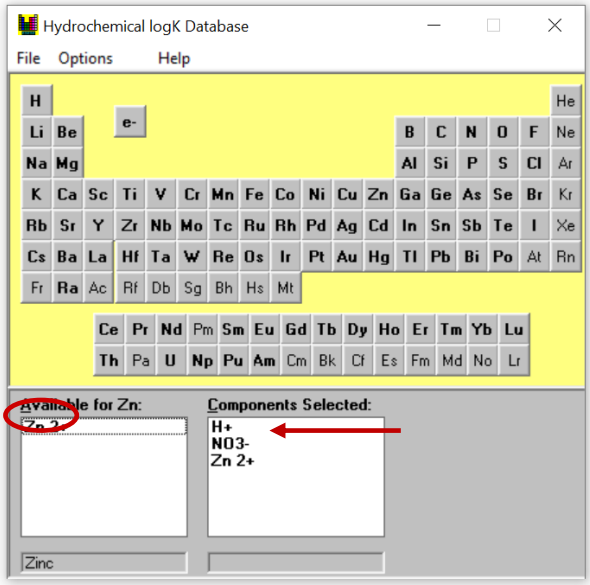
2. Haga clic en "NO3-¯" en la lista de componentes disponibles del nitrógeno. Tanto "H+" como " NO3-" aparecerán en la lista de componentes seleccionados.



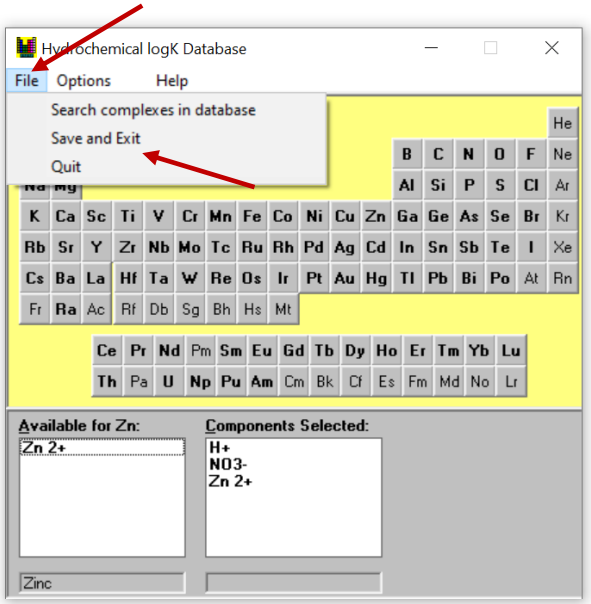

3. Haga clic en "Zn 2+" de la tabla periódica generada.



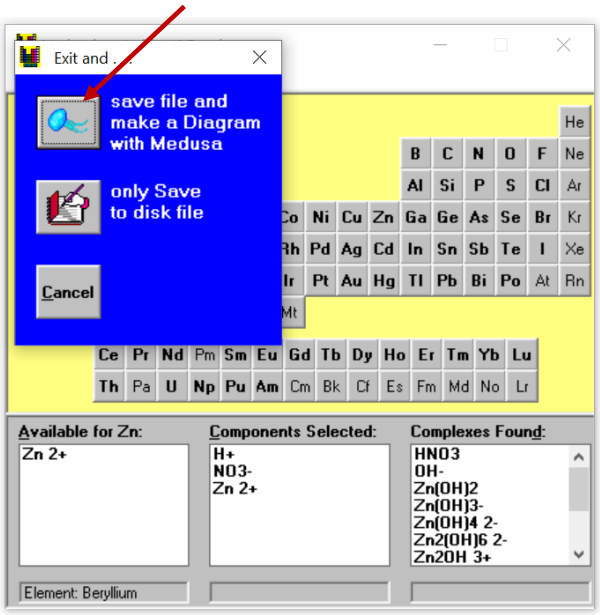
4. Haga clic en "Zn 2+" en la lista de componentes iónicos disponibles. "H+", " NO3-" y "Zn2+" aparecerán en la lista de componentes seleccionados.



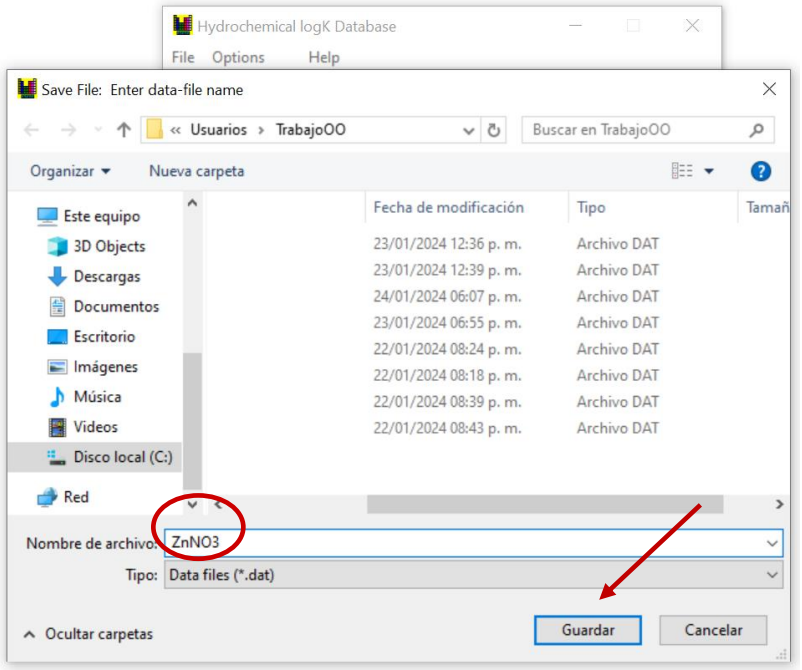

5. Haga clic en el menú desplegable "File / Save and Exit".



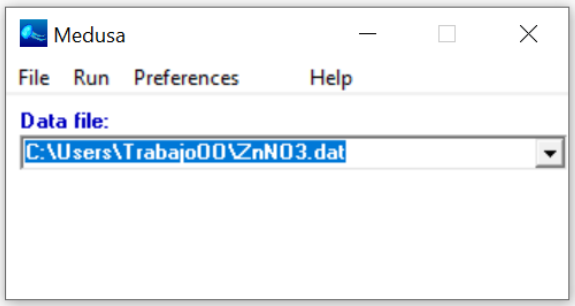
6. De Clic en el botón “MEDUSA” para hacer un diagrama.



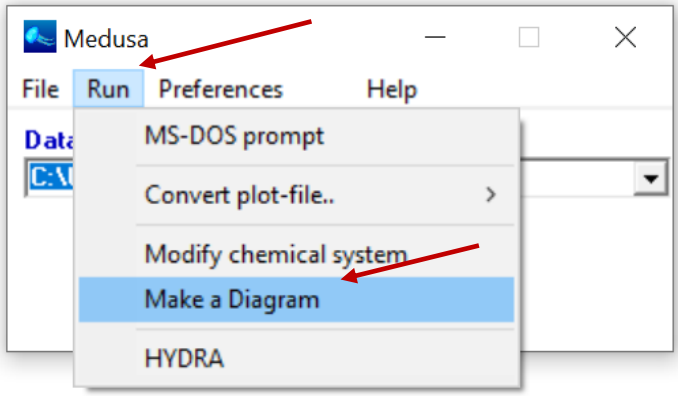

7. Introduzca un nombre de archivo**,** por ejemplo "$ZnNO_3$" y guarde el archivo.



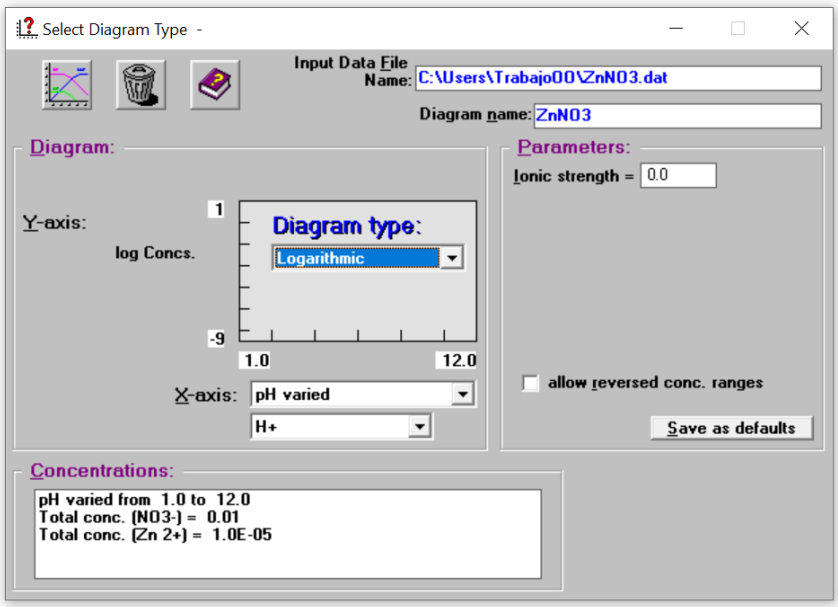
8. Aparecerá la ventana principal de MEDUSA.




9. Haga clic en el menú desplegable "Run/Make a Diagram".




10. Aparecerá una nueva ventana para seleccionar qué tipo de diagrama desea.



## 2.2 Determinación de la concentración de cada ion (molaridad) caso nitrato de zinc

1. Considerando que el nitrato de zinc es hexahidratado, con formula $Zn(NO_3)_2{\cdot}6(H_2O)$, se debe calcular el porcentaje molecular en gramos/mol de cada especie del compuesto, en este caso zinc (Zn), nitrato ($NO_3$) y agua ($H_2O$) de la siguiente manera:

$$\boldsymbol{Subtotal\ de\ peso\ molecular} = (\boldsymbol{Pm})(\#\ \boldsymbol{de\ moleculas}) \qquad \textbf{( 30 )}$$

2. A partir de la formula se desglosa el peso molecular de cada especie según la tabla siguiente:

***Tabla 1 Desglose de pesos y porcentajes moleculares del nitrato de zinc hexahidratado***

| Átomo | # de moléculas | Peso molecular (PM) (g/mol) | Subtotal de peso molecular (g/mol) | Subtotal de peso molecular (%) |
|---|---|---|---|---|
| **Zn** | 1 | 65.38 | 65.38 | 21.98 |
| **$NO_3$** | 2 | 62.01 | 124.02 | 41.69 |
| **$H_2O$** | 6 | 18.016 | 108.096 | 36.33 |
| **Total** | | | **297.496** | **100** |

3. Considerando que se usan 1.5 gramos de nitrato de zinc hexahidratado, con una pureza del 100 %, se debe calcular la masa en gramos de cada ion de zinc y nitrato. De tal manera que se puedan estimar los porcentaje y los gramos de los iones Zn y de $NO_3$. Es importante hacer notar que las 6 moleculas del agua forman parte del peso molecular del nitrato, no obstante, no se toman en cuenta en la reacción debido a su disolución una vez que entra en contacto con el agua. Esto se realiza con la siguiente formula:

$$\boldsymbol{Masa\ en\ gramos} = \frac{(\boldsymbol{Subtotal\ de\ peso\ molecular})(\mathbf{1.5}\ \boldsymbol{g})}{\mathbf{100}} \qquad \textbf{( 31 )}$$

***Tabla 2 Desglose de las masas elementales del nitrato de zinc hexahidratado.***

| Átomo | # de moléculas | Peso molecular (PM) (g/mol) | Subtotal de peso molecular (g/mol) | Subtotal de peso molecular (%) | Masa en gramos (M) (g) |
|---|---|---|---|---|---|
| **Zn** | 1 | 65.38 | 65.38 | 21.98 | 0.33 |
| **$NO_3$** | 2 | 62.01 | 124.02 | 41.69 | 0.62 |
| **$H_2O$** | 6 | 18.016 | 108.096 | 36.33 | 0.55 |
| **Total** | | | **297.496** | **100** | **1.5** |

4. Por lo tanto se tienen 0.33 gramos de Zn, 0. 62 gramos de $NO_3$ y 0.5 gramos de $H_2O$ en 1.5 gramos de nitrato de zinc hexahidratado.
5. Para calcular la Molaridad de cada especie, considerando 1.5 g de nitrato de zinc hexahidratado, se usarán 100 ml de agua desionizada, puesto que en la fórmula el volumen se debe considerar en litros lo valoraremos cómo 0.1 litros. Aplicamos la siguiente formula:

$$\boldsymbol{Molaridad} = \frac{(\boldsymbol{M})\ (\boldsymbol{Pureza})}{(\boldsymbol{Pm})\ (\boldsymbol{V})} \qquad \textbf{( 32 )}$$

*Donde:*

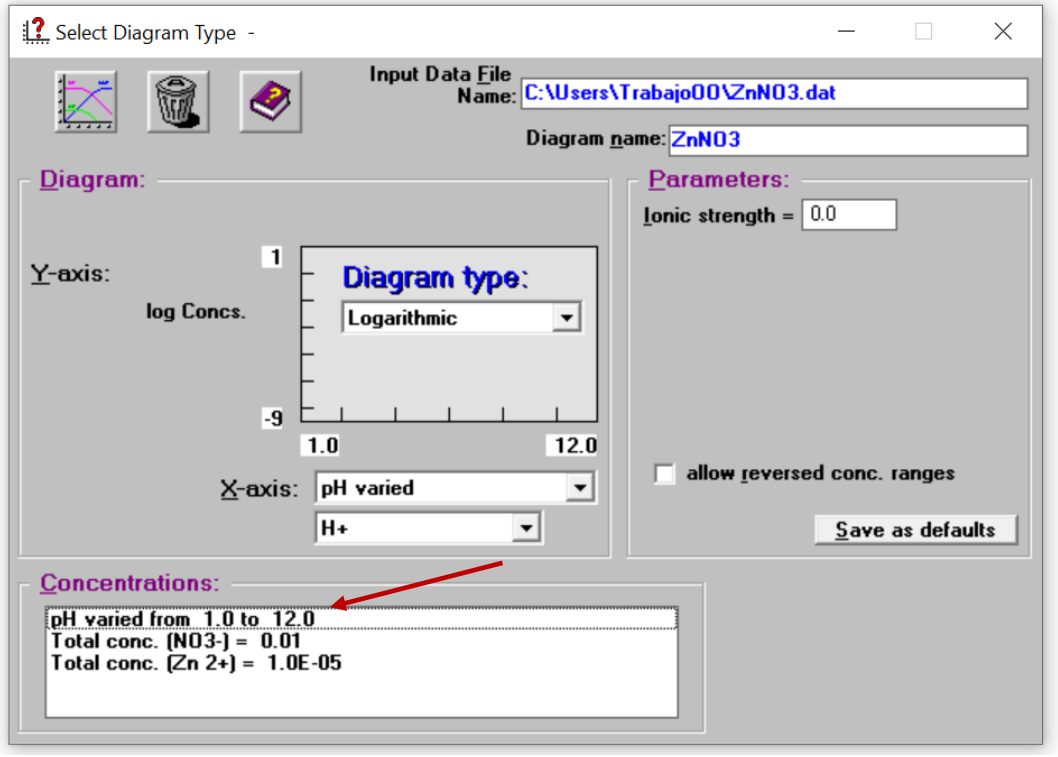
*M es igual a la masa en gramos*
*Pureza considerada en fracción*
*Pm es el peso molecular en g/mol*
*V es volumen en litros*

***Tabla 3 Cálculo de la molaridad elemental del nitrato de zinc hexahidratado.***

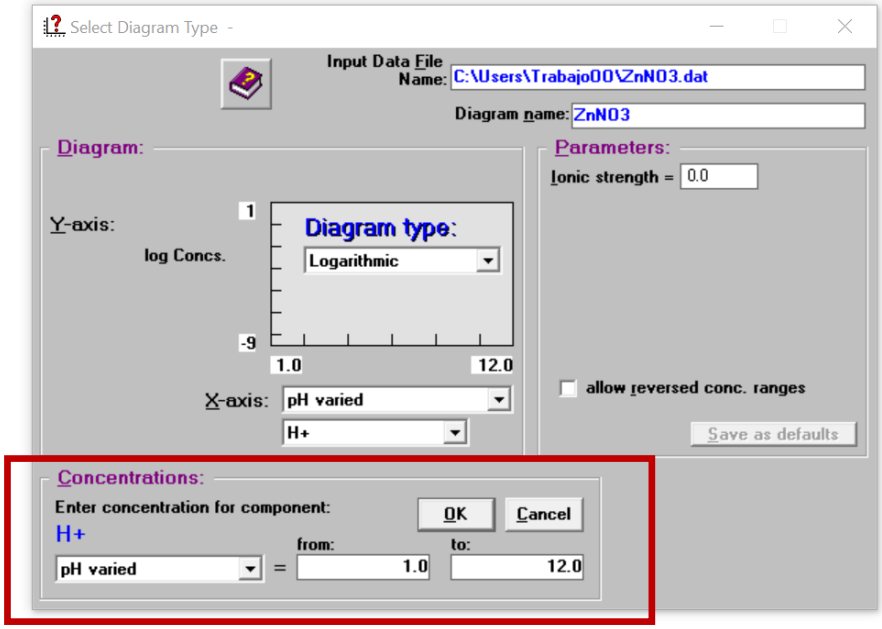
| Átomo | # de moléculas | Peso molecular (PM) (g/mol) | Subtotal de peso molecular (g/mol) | Subtotal de peso molecular (%) | Masa en gramos (M) (g) | Molaridad (Moles/L) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| **Zn** | 1 | 65.38 | 65.38 | 21.98 | 0.33 | 0.0504 |
| **$NO_3$** | 2 | 62.01 | 124.02 | 41.69 | 0.62 | 0.1008 |
| **$H_2O$** | 6 | 18.016 | 108.096 | 36.33 | 0.55 | 0.3024 |
| **Total** | | | **297.496** | **100** | **1.5** | |

## 2.3 Segunda etapa en la generación de diagramas de equilibrio caso nitrato de zinc

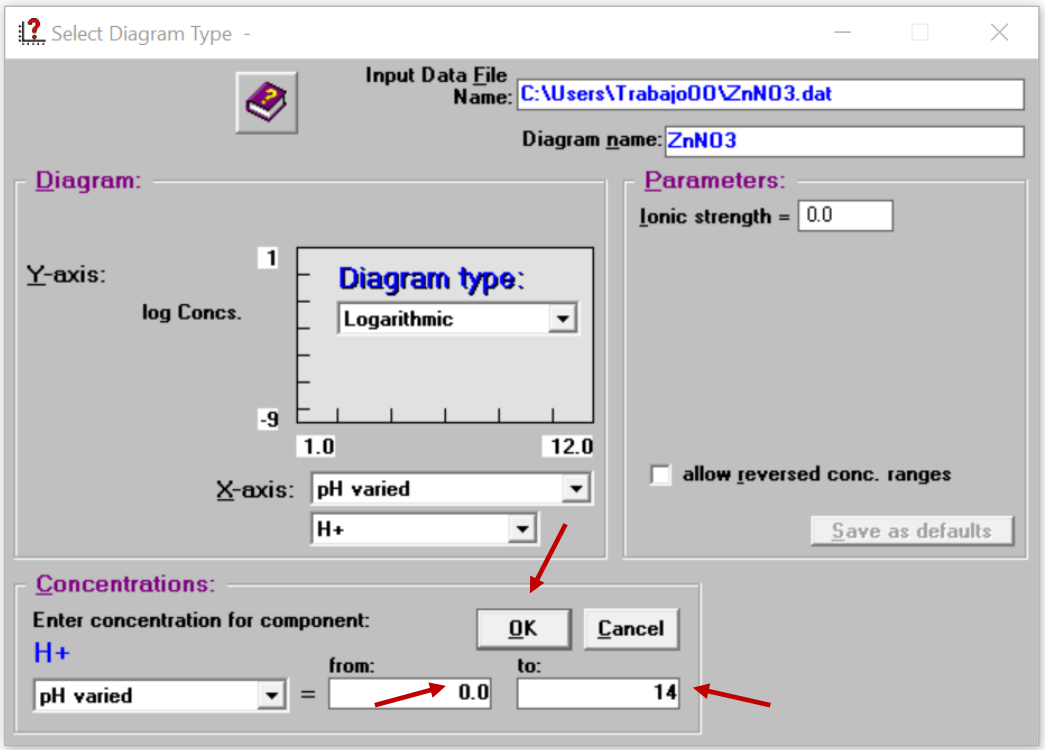
**1.** Haga clic en “pH varied from” en la esquina inferior izquierda de la ventana.



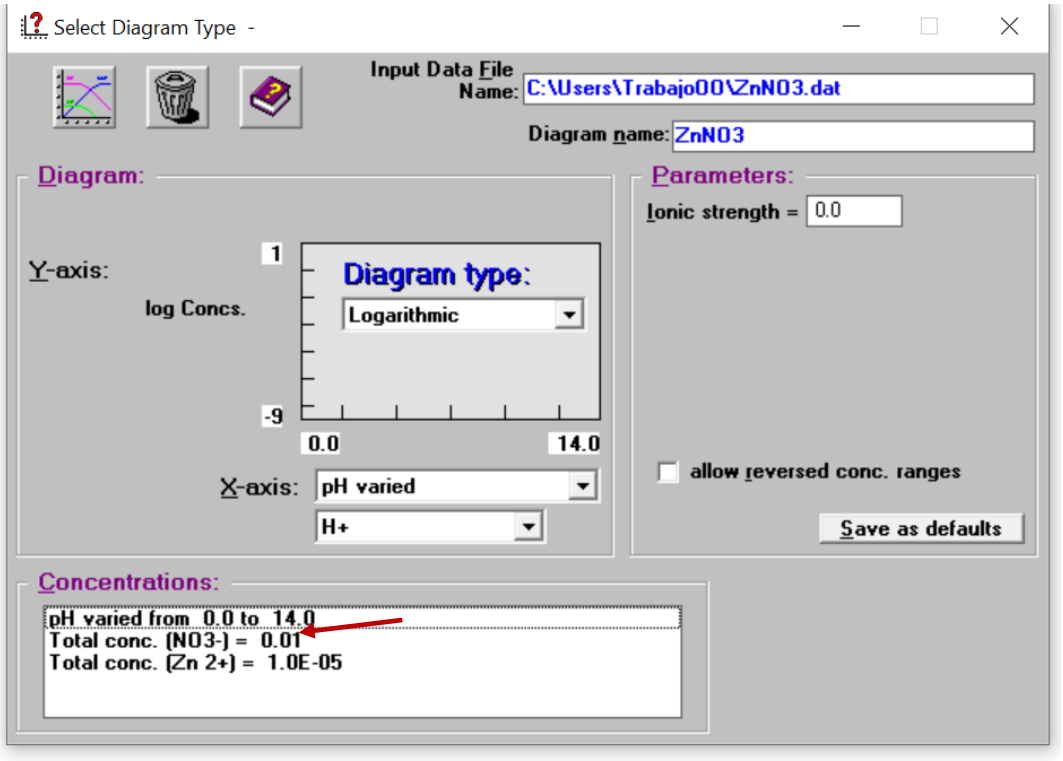
**2.** Aparecerá el rango de pH que desea insertar.



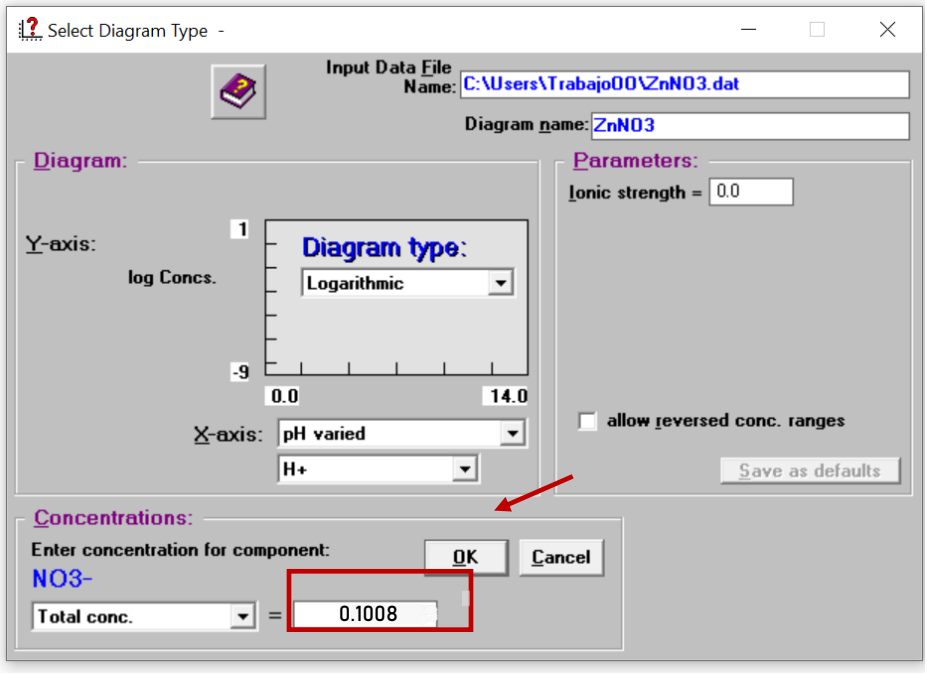

**3.** Introduzca el rango de Ph de 0 a 14 y haga clic en “OK”.



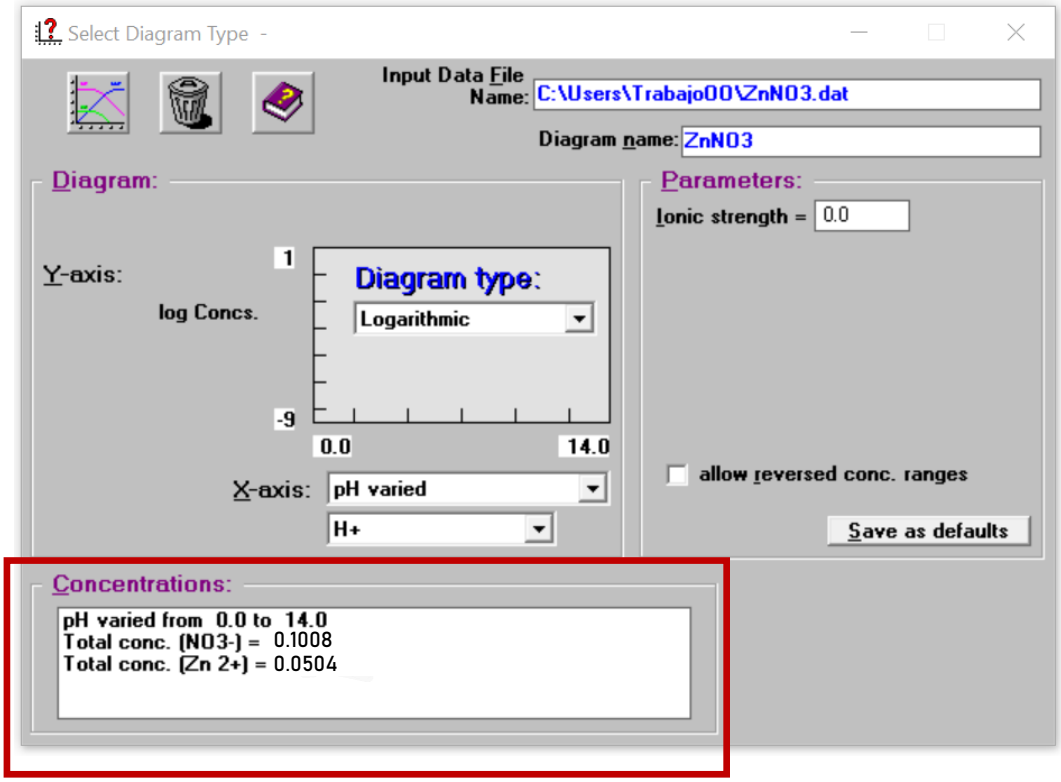
**4.** Haga clic en “Total conc. (NO3-)” en la esquina inferior izquierda de la ventana.



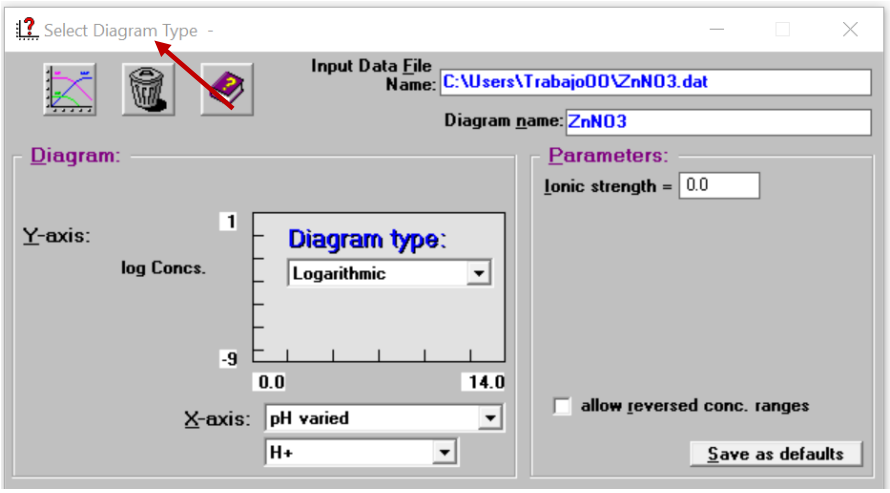

**5.** Introduzca la Molaridad calculada en Tabla 3 del ion NO3- que es de 0.1008 y haga clic en “OK”.



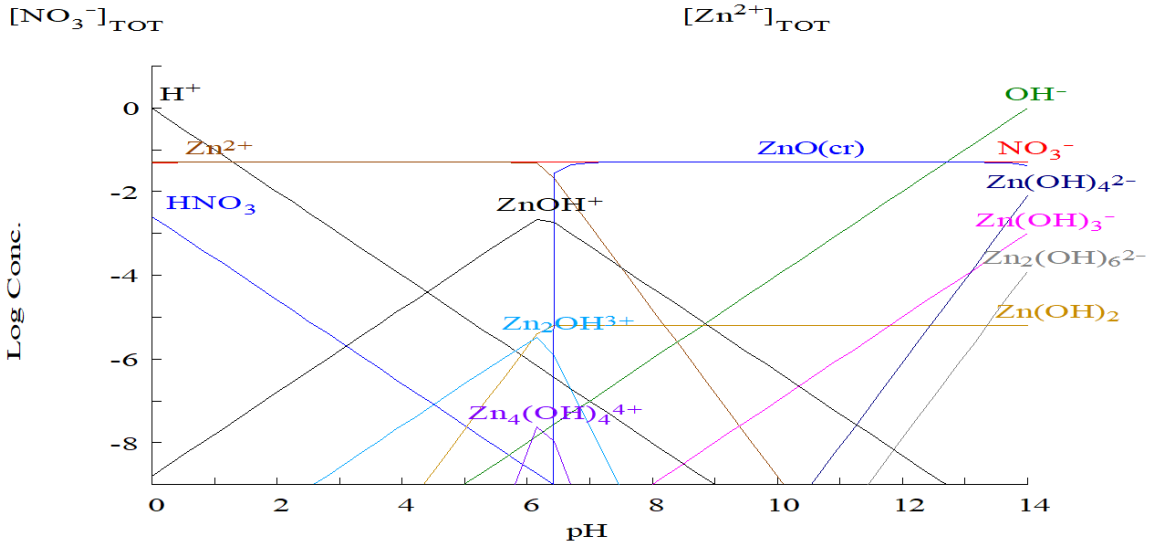
**6.** Repita el mismo procedimiento en “Total conc. (Zn 2+)”, introduzca la Molaridad de 0.0504 correspondiente a Zn y haga clic en “OK”.



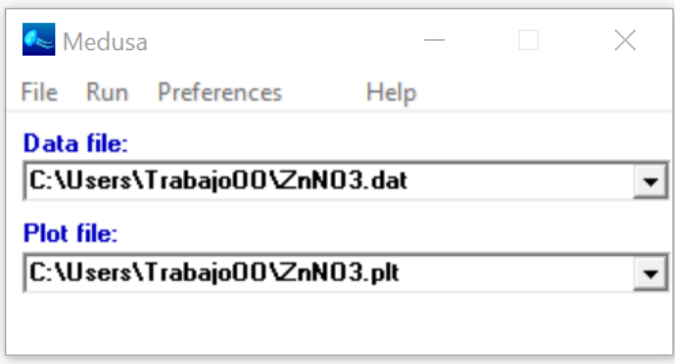

**7.** Haga clic en el botón “Diagram” en la esquina superior izquierda de la ventana.



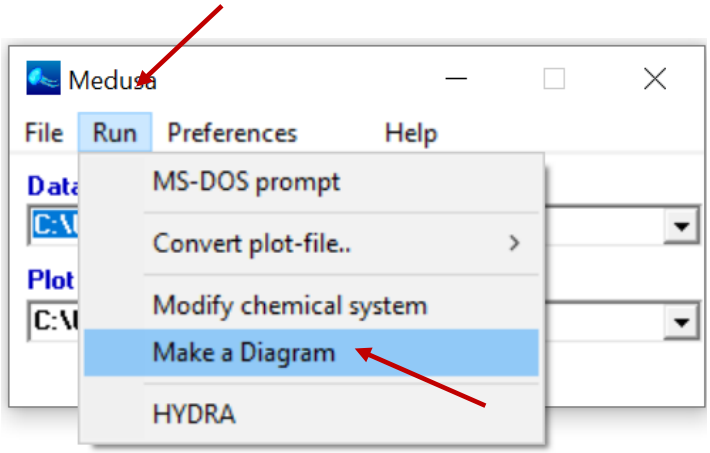
**8.** Los cálculos serán realizados por el programa para crear un diagrama del tipo logarítmico. Cuando los cálculos hayan terminado, el diagrama será mostrado en una ventana de la siguiente manera.



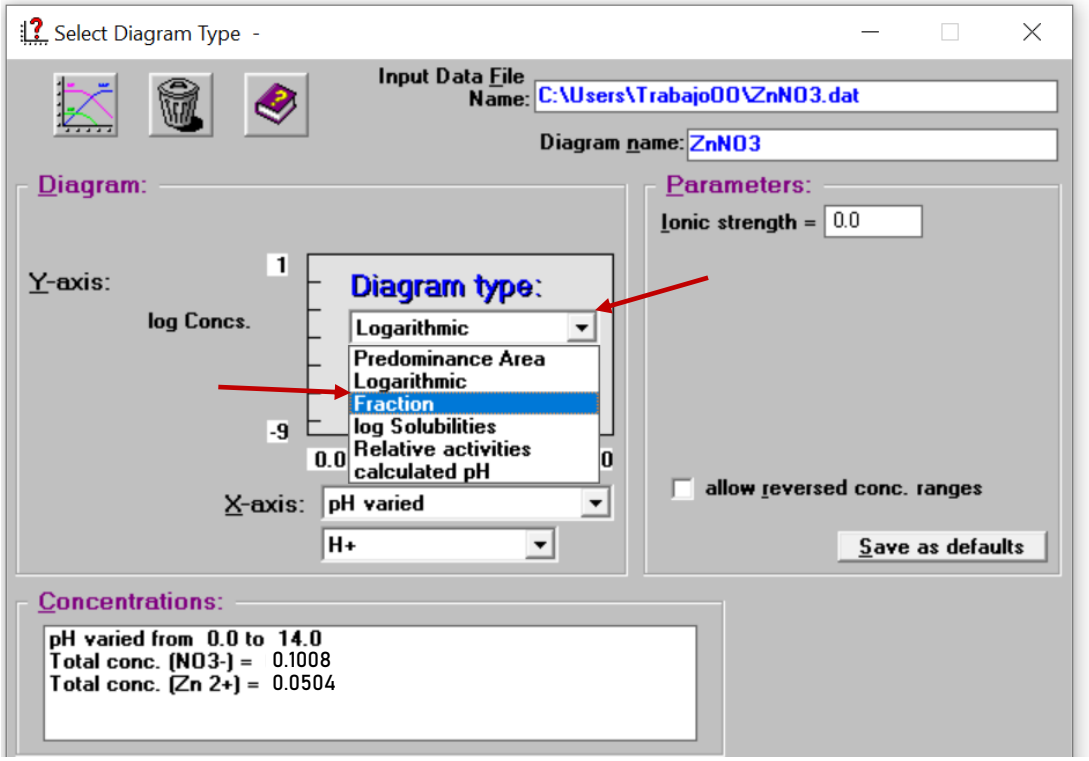

**9.** Para crear un diagrama del tipo Fracción vs pH, cierre esa ventana. Aparecerá la ventana principal de MEDUSA.



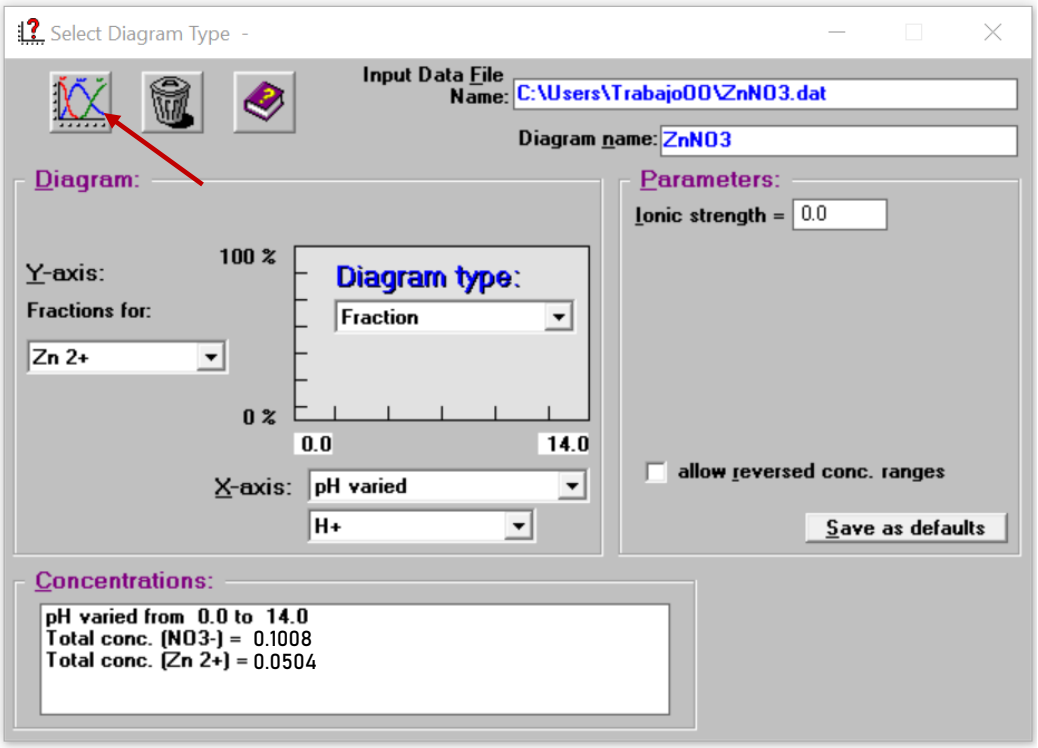
**10.** Haga clic en el menú desplegable "Run/Make a Diagram".



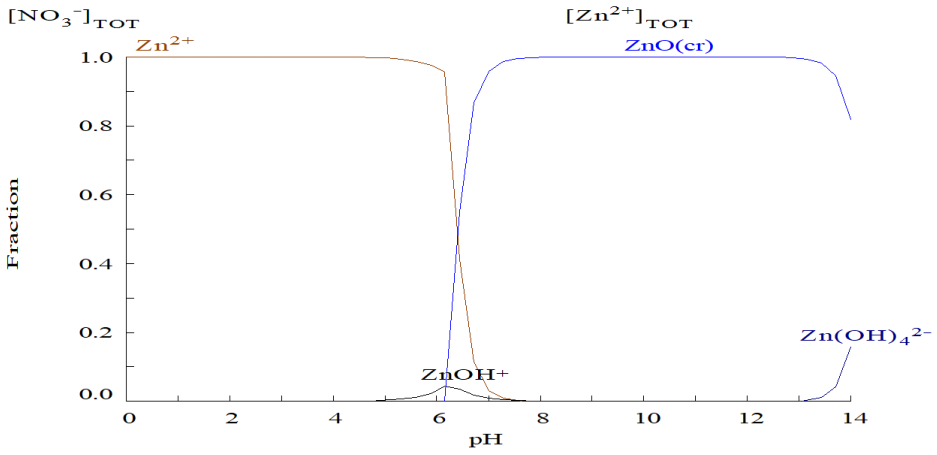

**11.** Aparecerá la siguiente ventana donde debe seleccionar qué tipo de diagrama desea. Haga clic en el menú desplegable en “Diagram type” y seleccione “Fraction”.



**12.** Haga clic en el botón “Diagram” en la esquina superior izquierda de la ventana.




**13.** Los cálculos serán realizados por el programa para crear un diagrama del tipo fracción. Cuando los cálculos hayan terminado, el diagrama será mostrado en una ventana de la siguiente manera.

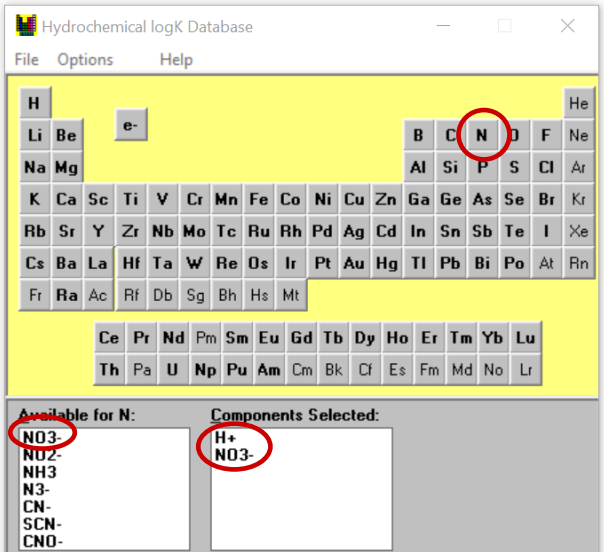


## 2.4 Efecto del pH alcalino en el nitrato de zinc en solución

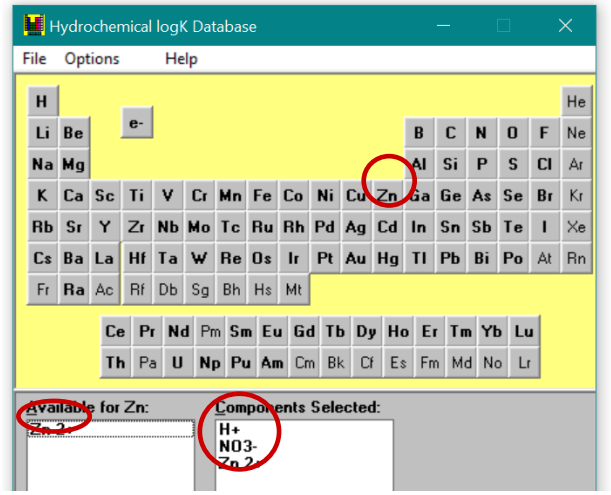
Partiendo del objetivo de obtener óxido de zinc a partir del nitrato de zinc y de acuerdo al diagrama debemos incrementar el pH. Para esto se utilizará una base, en este caso NaOH.

### *Nitrato de zinc + hidróxido de sodio*

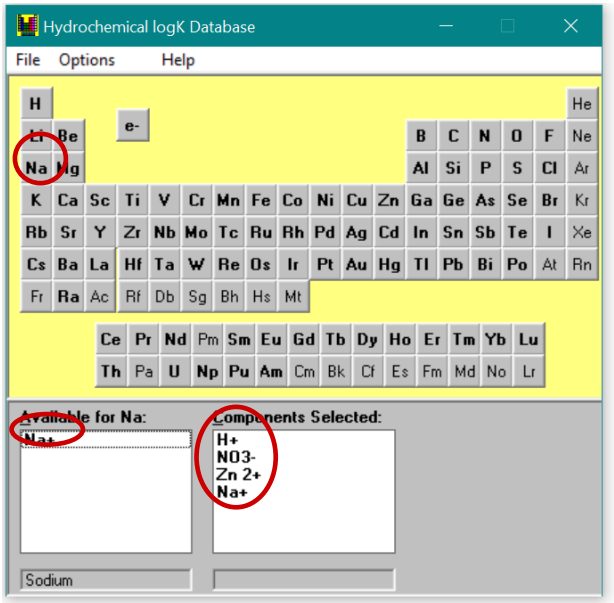
1. Inicie HYDRA y haga clic en el elemento nitrógeno "N" en la tabla periódica. Seleccione "NO3-" en la lista de componentes disponibles. Tanto "$H^+$" como " NO3-" aparecerán en la lista de componentes seleccionados.



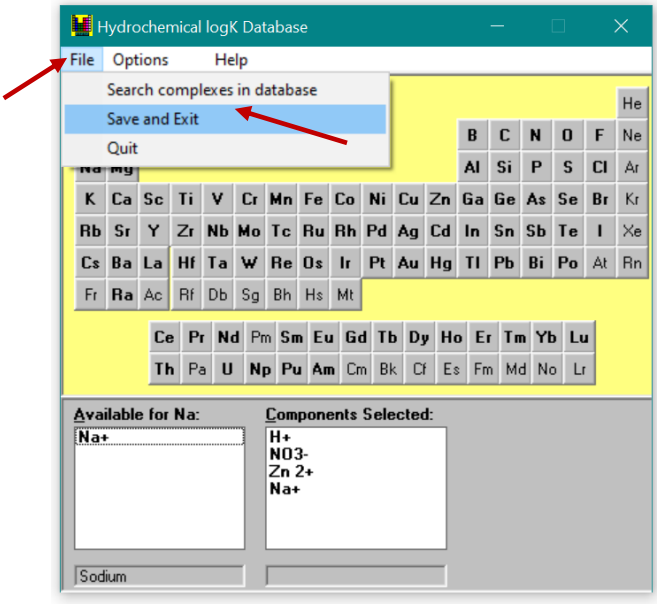
**2.** Haga clic en "Zn" en la tabla periódica. Seleccione "Zn $2^{+}$" en la lista de componentes disponibles. "H+", " NO3-" y "Zn 2+" aparecerán en la lista de componentes seleccionados.



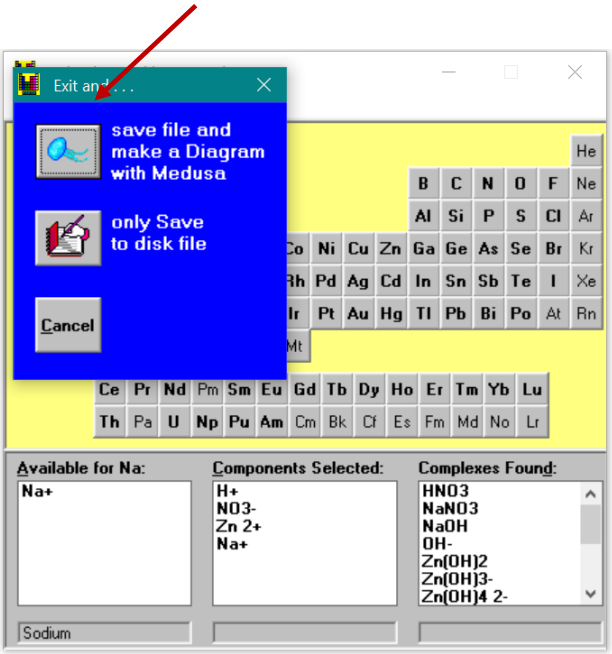

**3.** Haga clic en "Na" en la tabla periódica. Seleccione "Na+" en la lista de componentes disponibles. "H+", " NO3-", "Zn2+" y "Na+" aparecerán en la lista de componentes seleccionados.



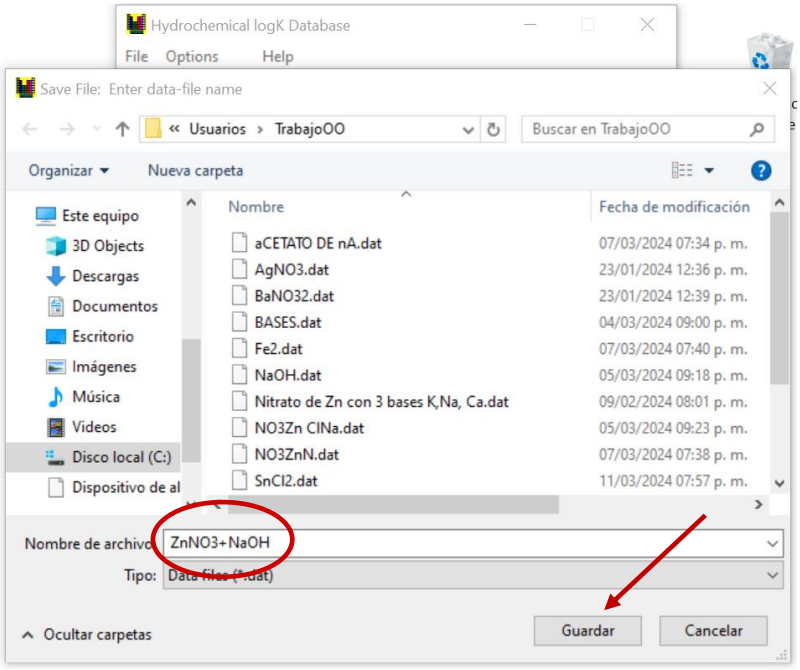
4. Haga clic en el menú desplegable "File / Save and Exit".



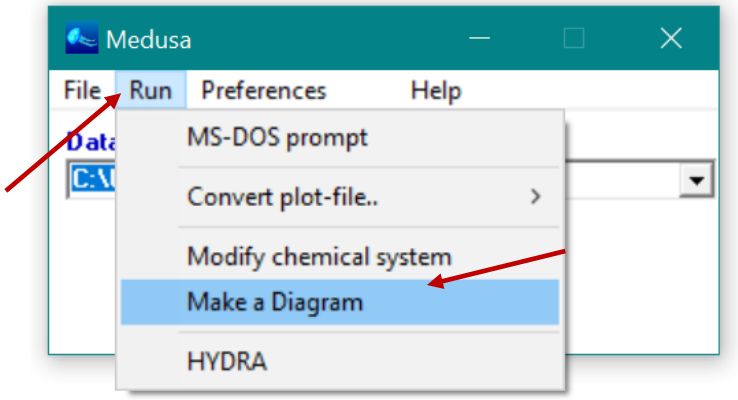

5. De Clic en el botón “MEDUSA” para hacer un diagrama.



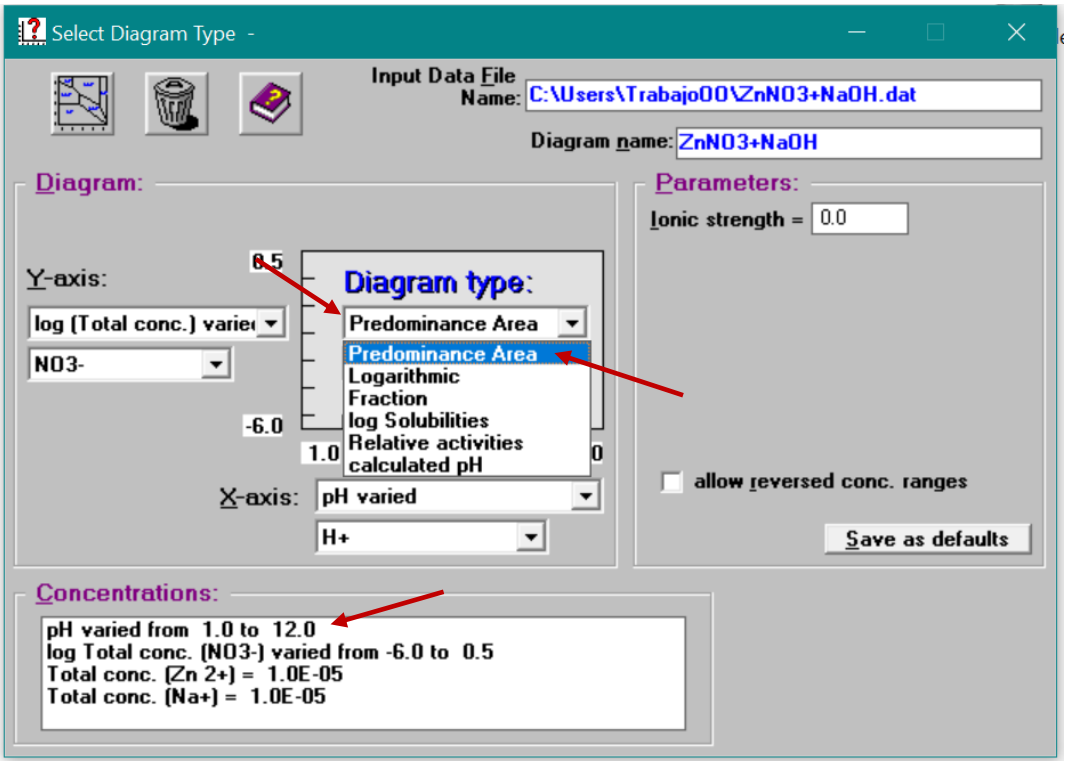

6. Introduzca un nombre de archivo, por ejemplo "$ZnNO_3$+NaOH" y guarde el archivo.



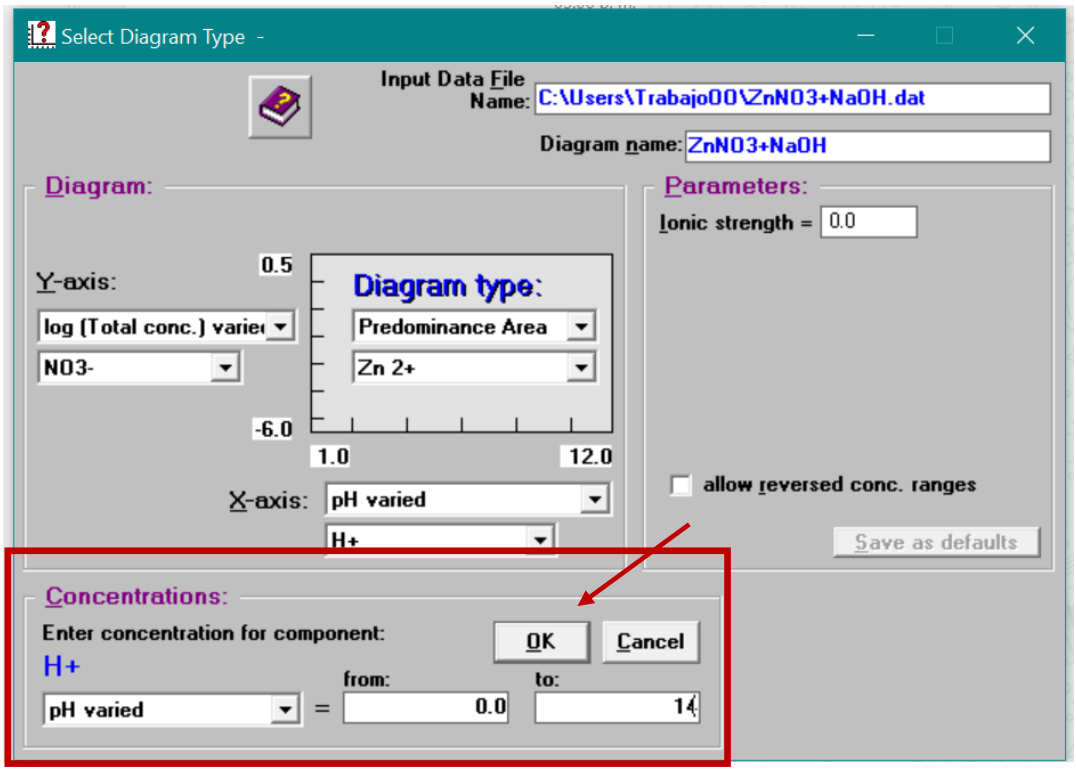

**7.** Aparecerá la ventana principal de MEDUSA. Haga clic en el menú desplegable "Run/Make a Diagram".



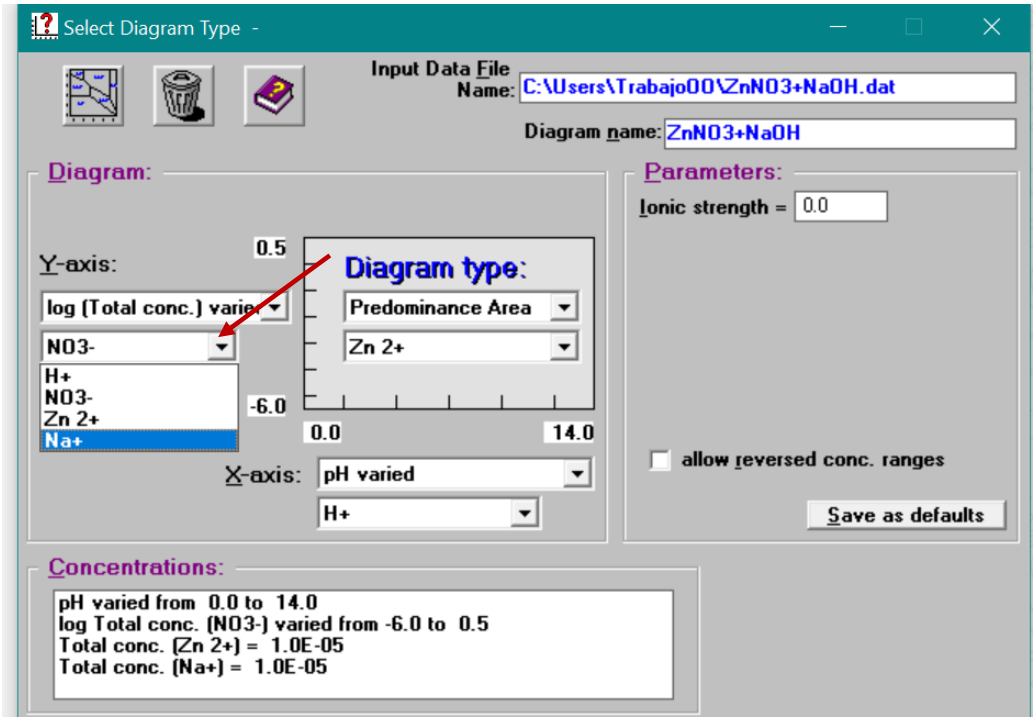

**8.** Aparecerá una nueva ventana para seleccionar qué tipo de diagrama desea. Haga clic en el menú desplegable en “Diagram type” y seleccione “Predominance Area” (Área de predominancia). Haga clic en “pH varied from” en la esquina inferior izquierda de la ventana.



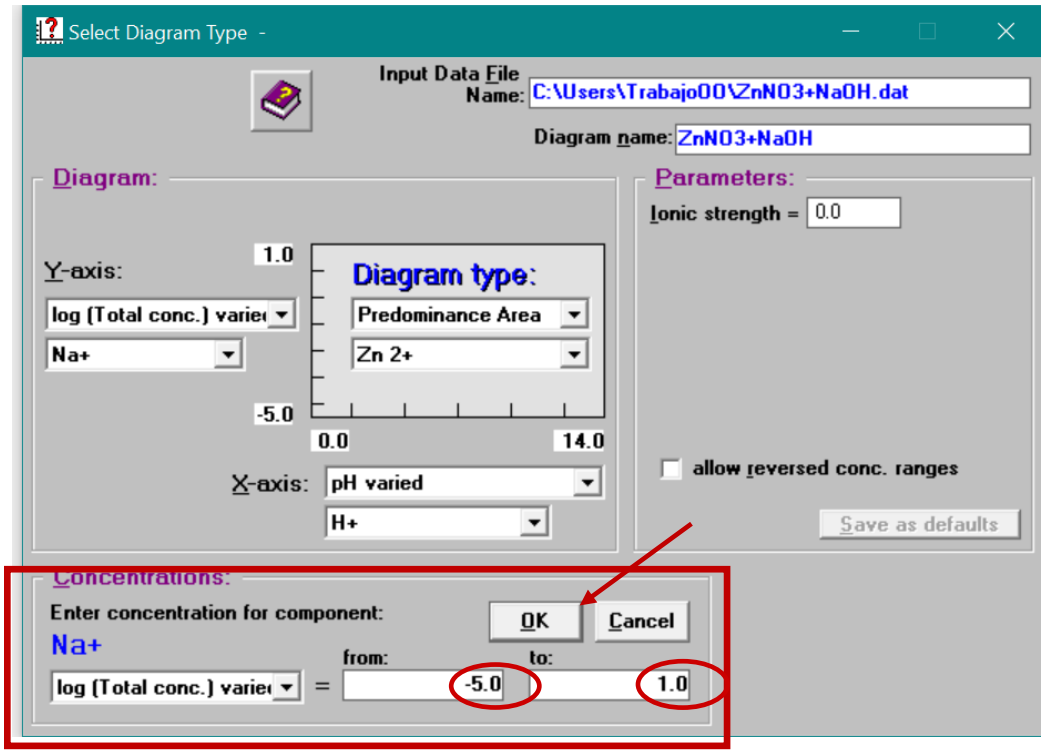

**9.** Introduzca el rango de pH de 0 a 14 y haga clic en “OK”.



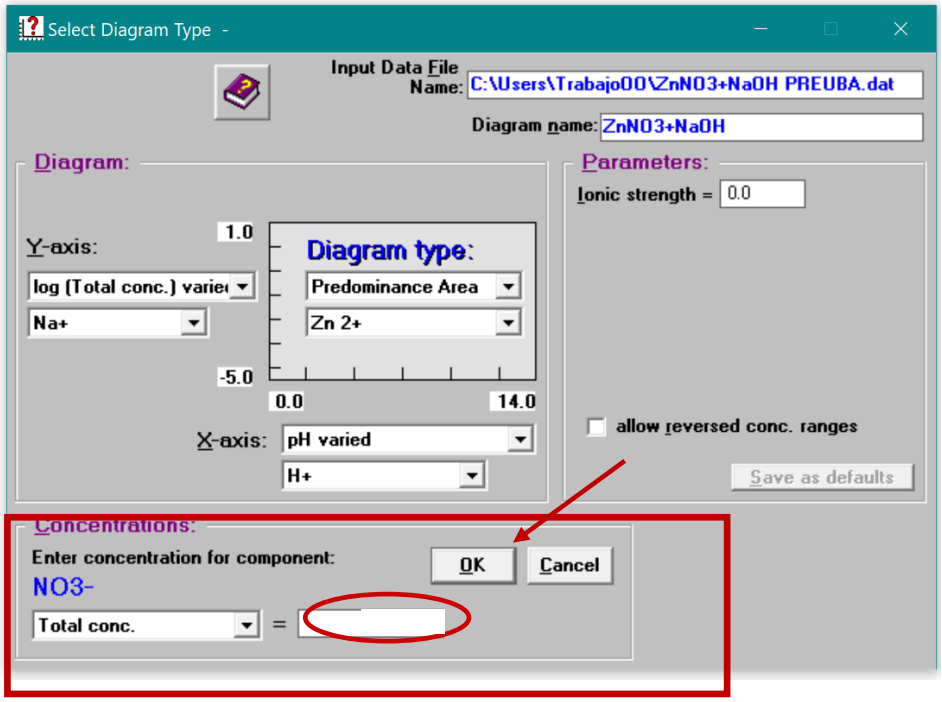
**10.** Haga clic en el segundo menú desplegable en “Y-axis:” y seleccione “Na+”.



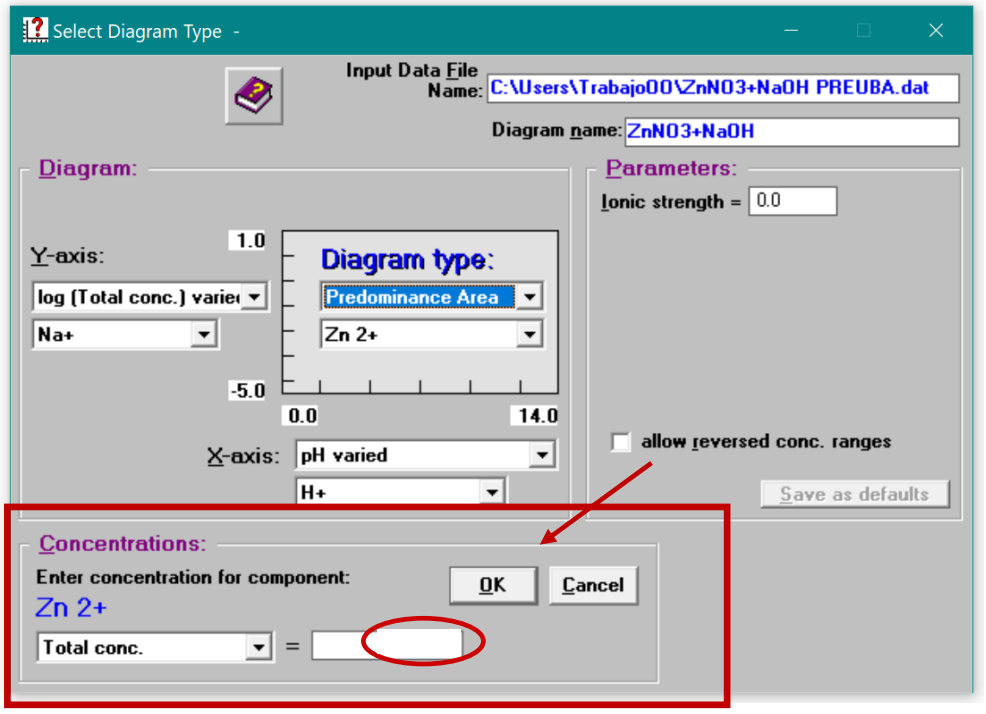

**11.** Haga clic en “log Total conc. (Na+) varied from” en la esquina inferior izquierda de la ventana. Introzuca el rango de concentracion para ese componente de -5 a 1 y haga clic en “OK”.



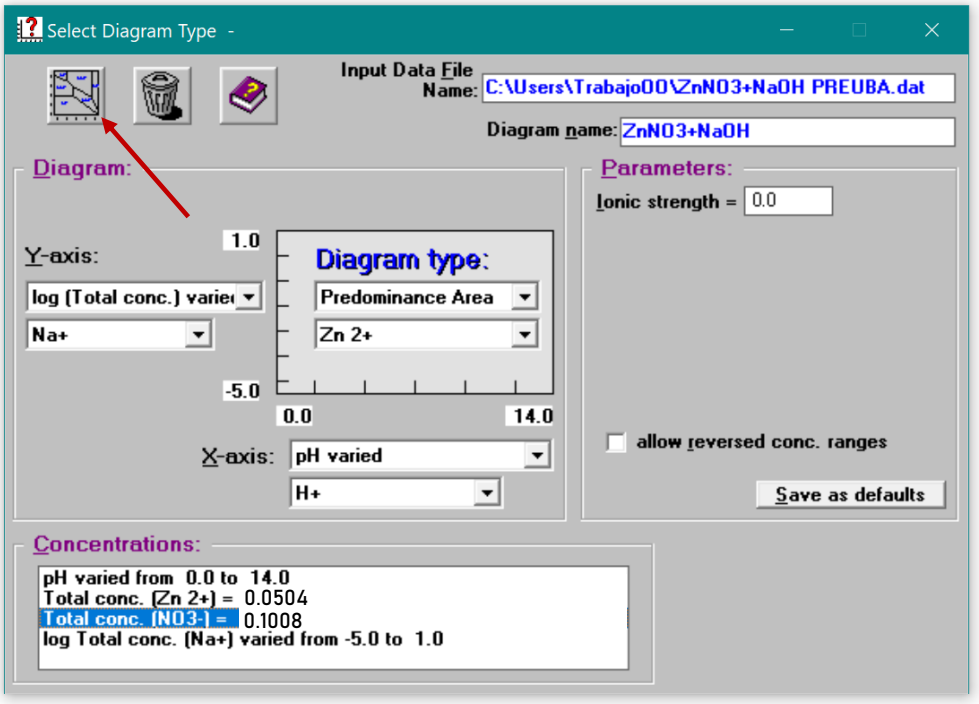
**12.** Haga clic en "Total conc. (NO3-)" en la esquina inferior izquierda de la ventana. Introduzca la Molaridad calculada en Tabla 3 del ión $NO_3^-$ que es de 0.1008 haga clic en "OK".



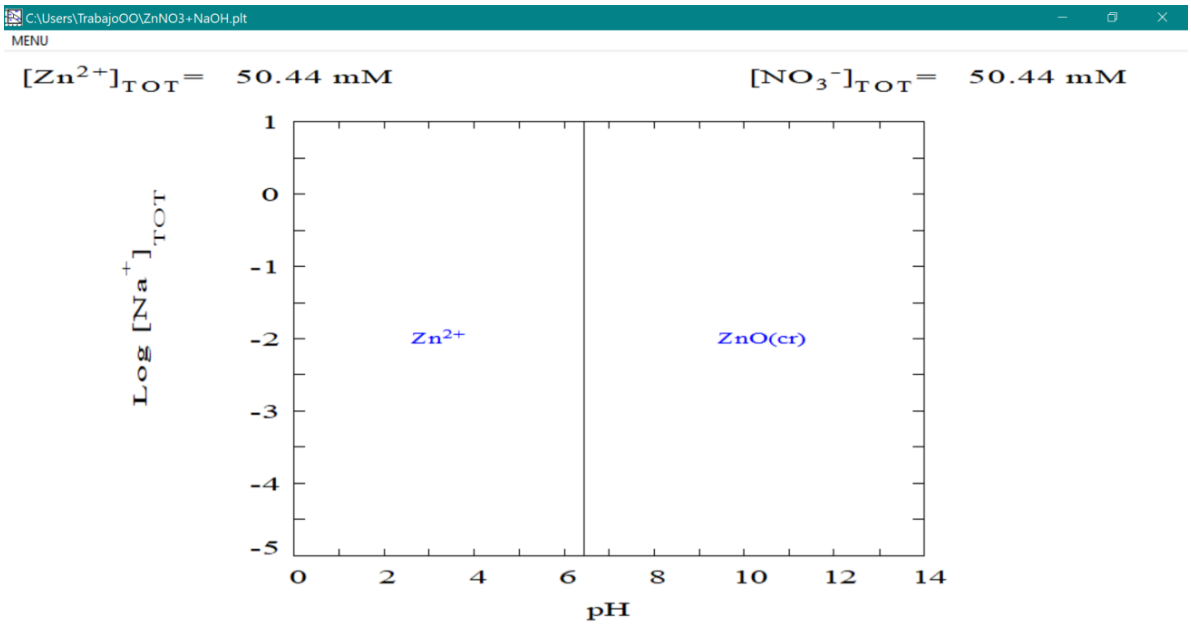

**13.** Repita el mismo procedimiento en "Total conc. (Zn 2+)", introduzca la Molaridad correspondiente al ion Zn y haga clic en "OK".



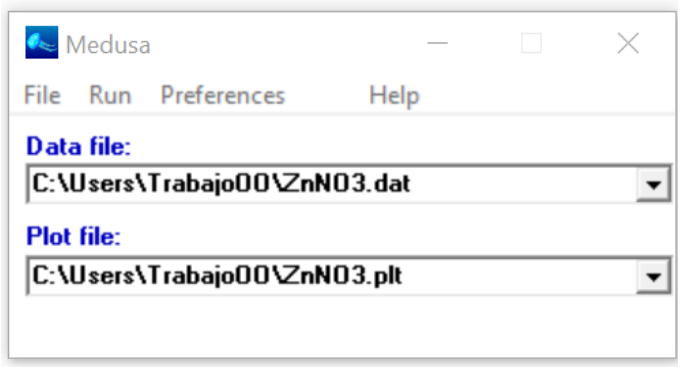
**14.** De clic en el botón “Diagram” en la esquina superior izquierda de la ventana.



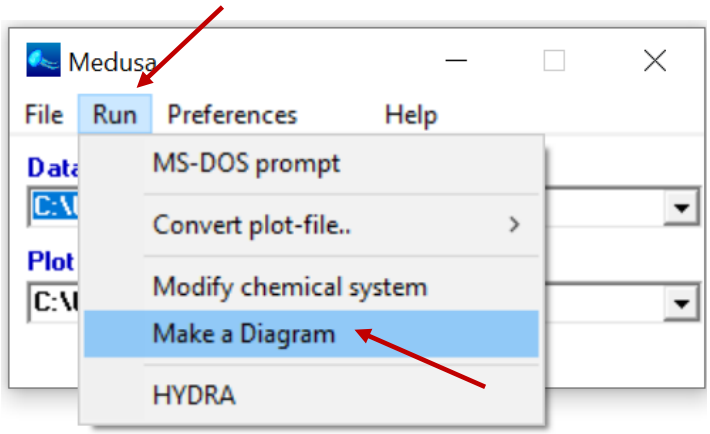

**15.** Los cálculos serán realizados por el programa para crear un Diagrama del tipo “Predominance Area” (Área de predominancia). Cuando los cálculos hayan terminado, el diagrama será mostrado en una ventana de la siguiente manera.



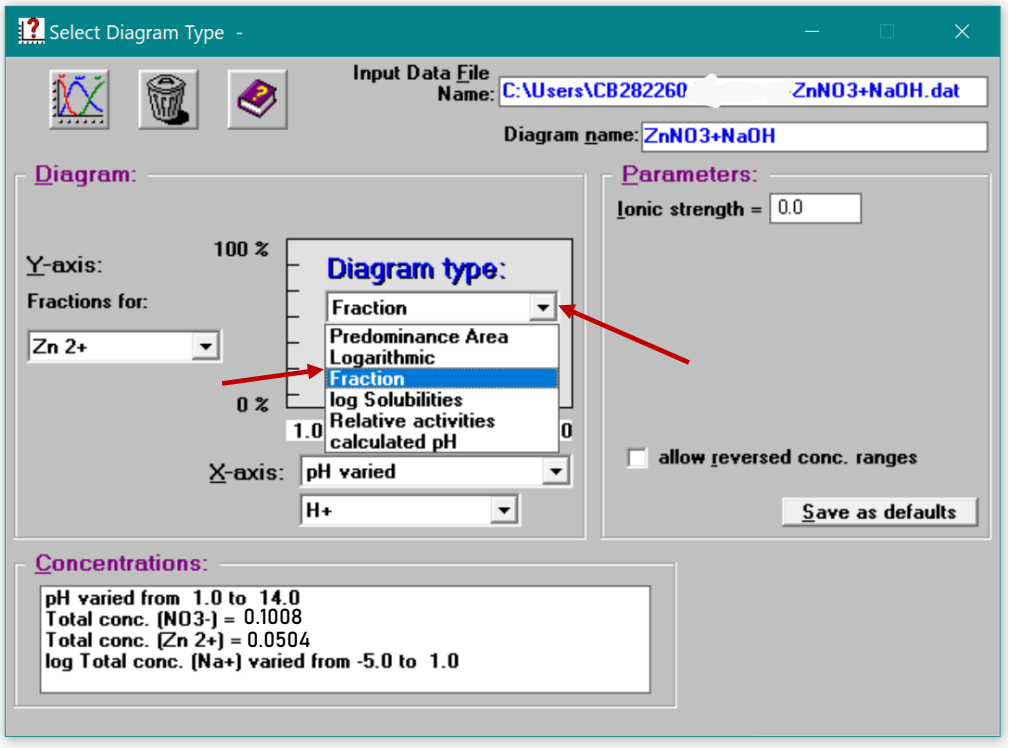
**16.** Para crear un Diagrama del tipo Fracción cierre esa ventana. Aparecerá la ventana principal de MEDUSA.



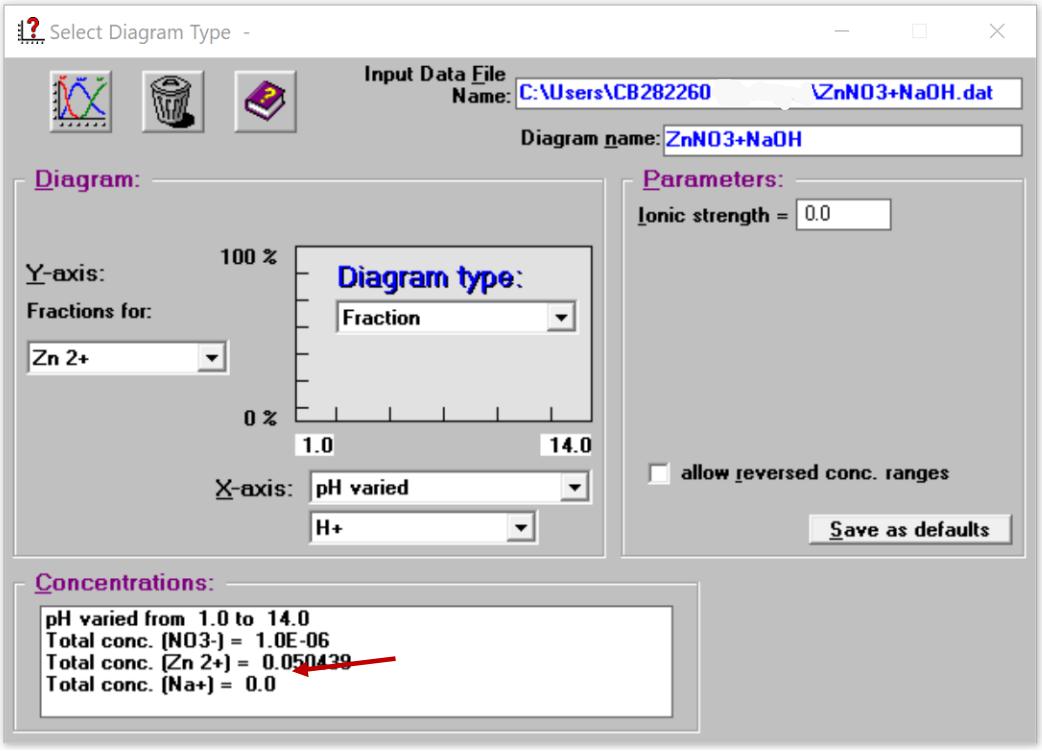

**17.** Haga clic en el menú desplegable "Run/Make a Diagram".



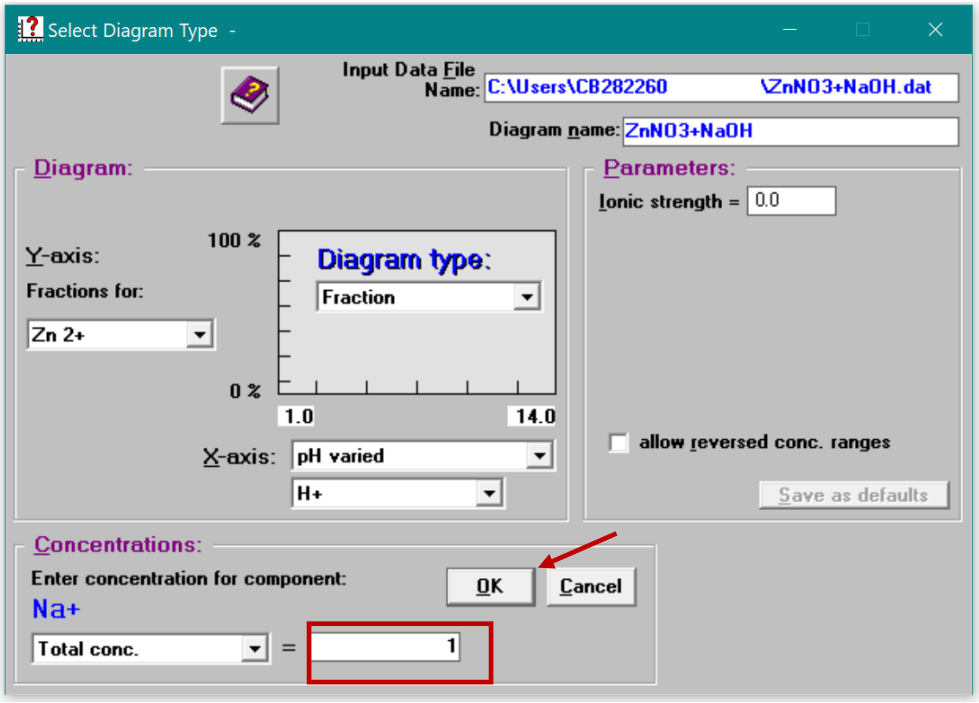
**18.** Aparecerá la siguiente ventana donde debe seleccionar qué tipo de diagrama desea. Haga clic en el menú desplegable en “Diagram type” y seleccione “Fraction”.



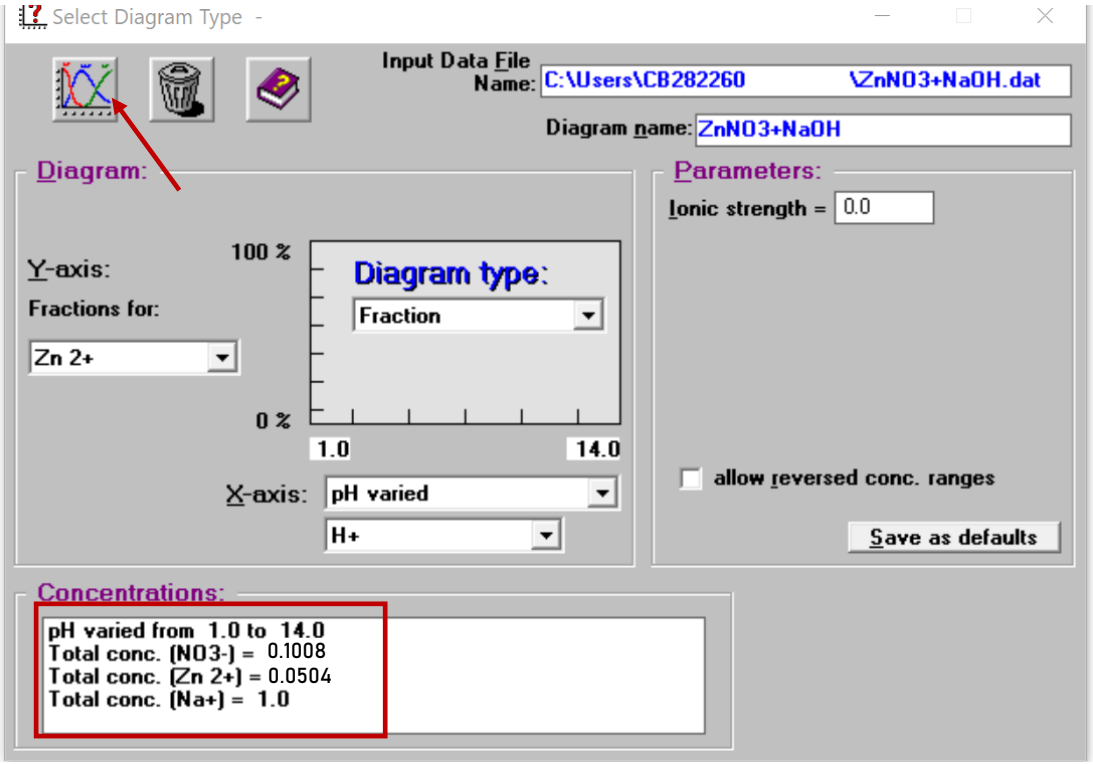
**19.** Al dar clic en Fraction hay que ingresar la molaridad de Na en las concentraciones. Haga clic en "Total conc. (Na+)" en la esquina inferior izquierda de la ventana.



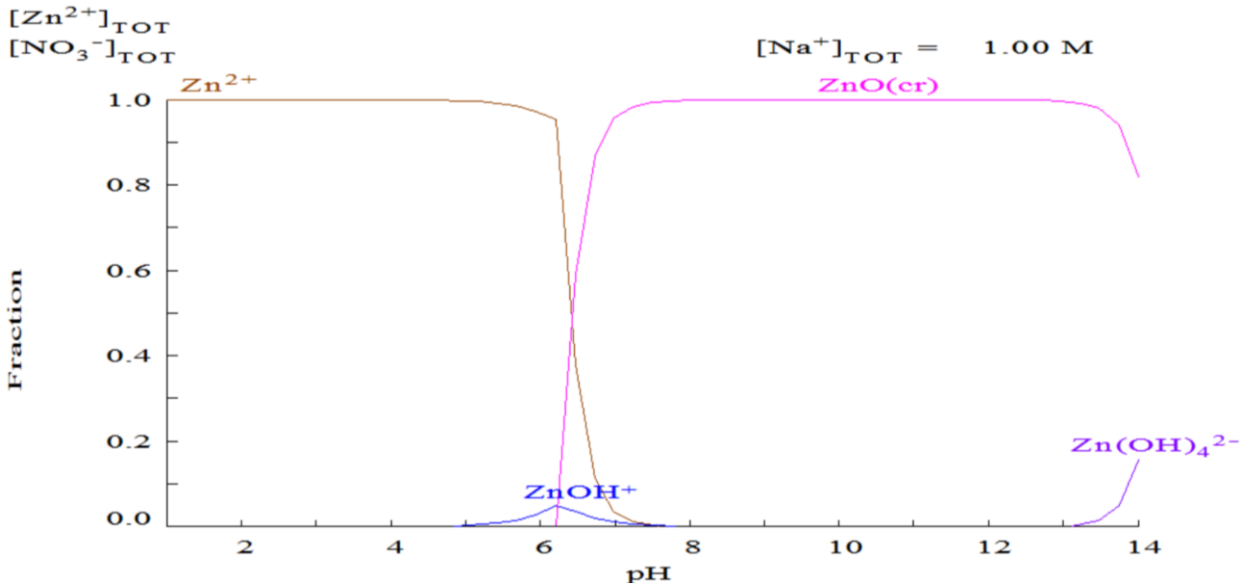

**20.** Introduzca la Molaridad de 1 y haga clic en "OK".



**21.** Revise que la tabla de concentraciones tenga los datos correctos 0.1008 para (NO3-), 0.0504 para (Zn 2+) y en (Na+) debe tener 1.0. Haga clic en el botón “Diagram” en la esquina superior izquierda de la ventana.



**22.** Los cálculos serán realizados por el programa para crear un Diagrama del tipo fracción. Cuando los cálculos hayan terminado, el diagrama será mostrado en una ventana de la siguiente manera.




## 2.5 Preparación de soluciones para la precipitación de óxido de zinc

Para corroborar los resultados predichos por el diagrama de equilibrio químico generado con el software HYDRA-MEDUSA, se llevaron a cabo una serie de experimentos prácticos diseñados para observar la precipitación del óxido de zinc a partir de una solución de nitrato de zinc hexahidratado y la adición gradual de una solución de hidróxido de sodio.

A continuación, se detallan los procedimientos realizados y los resultados obtenidos.

### *Preparación de la solución de nitrato de zinc*

Se peso 1.5 g de nitrato de zinc hexahidratado con una balanza analítica. El nitrato de zinc se disolvió en 100 mL de agua destilada en un vaso de precipitados de 250 mL, bajo agitación constante para asegurar la completa disolución del soluto. La solución resultante fue una solución

acuosa clara de nitrato de zinc con una concentración inicial determinada por la cantidad de soluto y el volumen de disolvente utilizado. Antes de la adición de hidróxido de sodio, se midió el pH de la solución, obteniéndose un valor de 5.56.

## *Preparación de la solución de hidróxido de sodio (NaOH).*

Se preparó una solución de 50 ml 1 Molar de hidróxido de sodio (NaOH). La molaridad (M) se define como los moles de soluto por litro de solución.

La fórmula para molaridad es:

$$\boldsymbol{M = \frac{moles\ de\ soluto}{litros\ de\ soluci\acute{o}n}} \quad \textbf{( 33 )}$$

Primero, convertimos el volumen de la solución a litros:

$$\boldsymbol{50\ ml\ =\ 0.050\ L} \quad \textbf{( 34 )}$$

Dado que deseas una solución 1 M:

$$\boldsymbol{1M = \frac{moles\ de\ NaOH}{0.050\ litros}} \quad \textbf{( 35 )}$$

Despejamos los moles de NaOH:

$$\boldsymbol{Moles\ de\ NaOH = 1\ M \times 0.050\ litros} \quad \textbf{( 36 )}$$

$$\textbf{Moles de NaOH} = \boldsymbol{0.050\ moles} \quad \textbf{( 37 )}$$

Ahora, convertimos los moles a gramos usando la masa molar de NaOH. La masa molar de NaOH es aproximadamente 39.997 g/mol:

$$\boldsymbol{Gramos\ de\ NaOH = moles\ de\ NaOH \times masa\ molar\ de\ NaOH} \quad \textbf{( 38 )}$$

$$\boldsymbol{Gramos\ de\ NaOH = 0.050\ moles \times 39.997\ g/mol} \quad \textbf{( 39 )}$$

$$\boldsymbol{Gramos\ de\ NaOH = 2\ gramos} \quad \textbf{( 40 )}$$

Por lo tanto, se necesitan 2 gramos de hidróxido de sodio para hacer 50 ml de una solución 1 M. Se comenzó la adición gradual de la solución de hidróxido de sodio 1 M a la solución inicial de nitrato de zinc, bajo constante agitación y a una temperatura ambiente de 25°C

aproximadamente. La adición de NaOH se realizó lentamente, monitoreando el pH con un pH-metro para asegurar una mezcla homogénea y evitar sobresaturación local, se registró un pH final de 11.95 tras la adición de 12 mL de del hidróxido de sodio.

# 3. CASO NITRATO DE NIQUEL (II) HEXAHIDRATADO $N_2(NiO_3)_2 \cdot 6\ H_2O$

## 3.1 Generación de diagramas de equilibrio para la experimentación con nitrato de níquel II

Para elaborar el diagrama de equilibrio químico para el caso del nitrato de níquel, seguiremos los pasos descritos en la *Sección 2.1, 2.2, 2.3 y 2.4 de la Metodología*, la diferencia será que, en lugar de utilizar zinc, emplearemos níquel.

Tal como se detalla en la *Sección 2.2*, es fundamental determinar la concentración de cada ion (molaridad). Finalmente, obtendremos tanto el diagrama de equilibrio químico logarítmico como el diagrama de fracción de especies para el sistema estudiado.

### *Concentración de cada ion (molaridad) caso nitrato de níquel II*

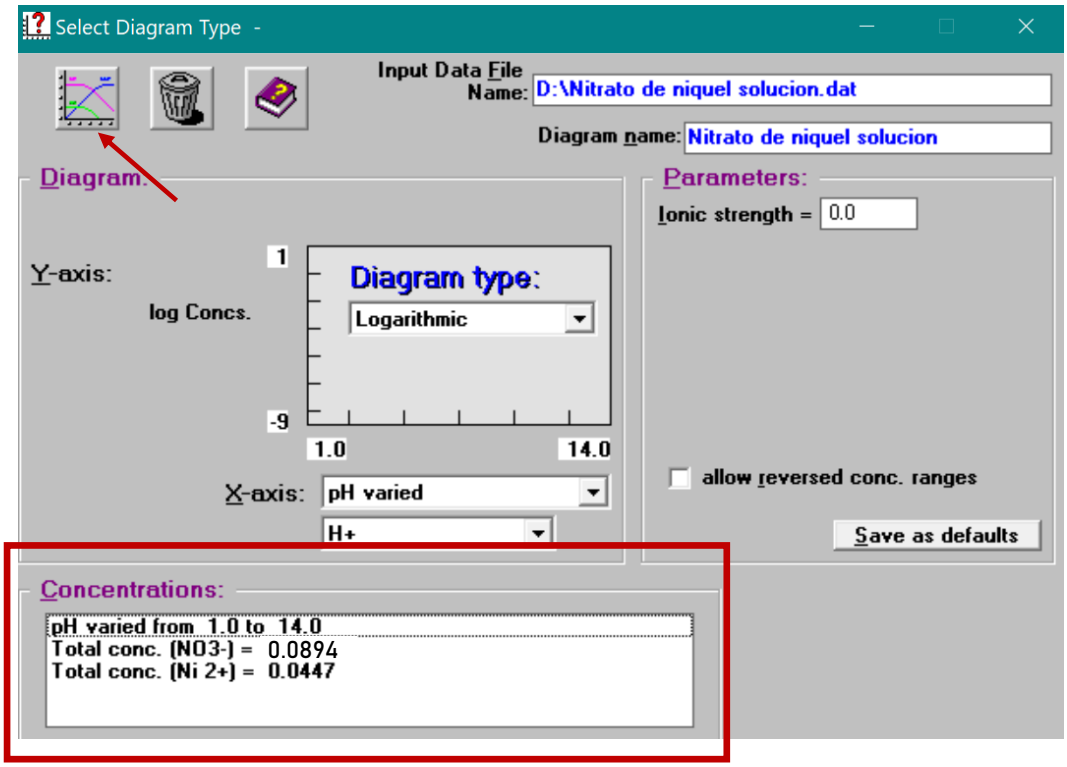
Se determinó la concentración de cada ion en 1.3 gramos de nitrato de níquel (II) hexahidratado, disuelto en 100 mL de agua desionizada. Para ello, se siguieron meticulosamente los pasos descritos en la sección 2.2, aplicando cada fórmula correspondiente. Como resultado, se obtuvo la **Error! Reference source not found.**.

***Tabla 4 Desglose de las masas elementales del nitrato de níquel hexahidratado***

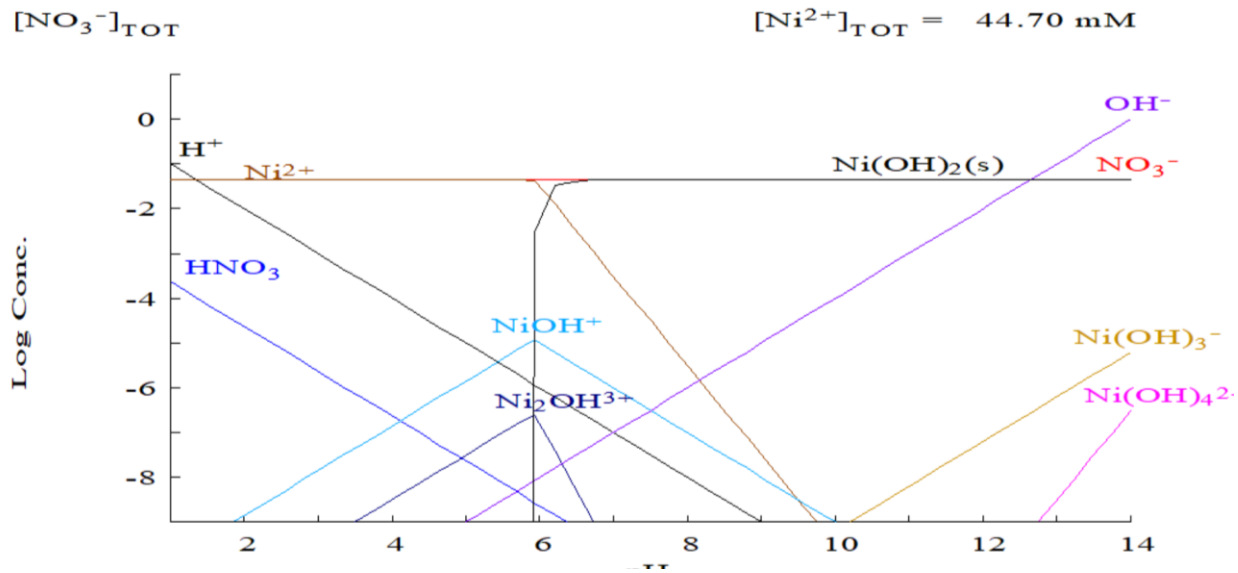
| Átomo | # de moléculas | Peso molecular (PM) (g/mol) | Subtotal de peso molecular (g/mol) | Subtotal de peso molecular (%) | Masa en gramos (M) (g) | Molaridad (Moles/L) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| **Ni** | 1 | 58.69 | 58.69 | 20.18 | 0.2623 | 0.0447 |
| **$NO_3$** | 2 | 62.01 | 124.02 | 41.69 | 0.5543 | 0.0894 |
| **$H_2O$** | 6 | 18.016 | 108.096 | 37.17 | 0.4832 | 0.268 |
| **Total** | | | **290.806** | **100** | **1.3** | |

### *Generación de diagramas de equilibrio caso nitrato de níquel II*

Una vez obtenidas las concentraciones para cada ion en 1.3 gramos de nitrato de níquel II hexahidratado, procedemos a ingresar los datos en el programa para construir los diagramas de equilibrio químico, siguiendo los pasos descritos en las *Secciones 2.1 y 2.3 de la Metodología*. La única diferencia es que, en lugar de ingresar zinc, debemos ingresar níquel (Ni). Es fundamental revisar que las concentraciones estén correctamente introducidas en el programa antes de elaborar los diagramas, tal como se indica en la imagen siguiente en “concentrations”.

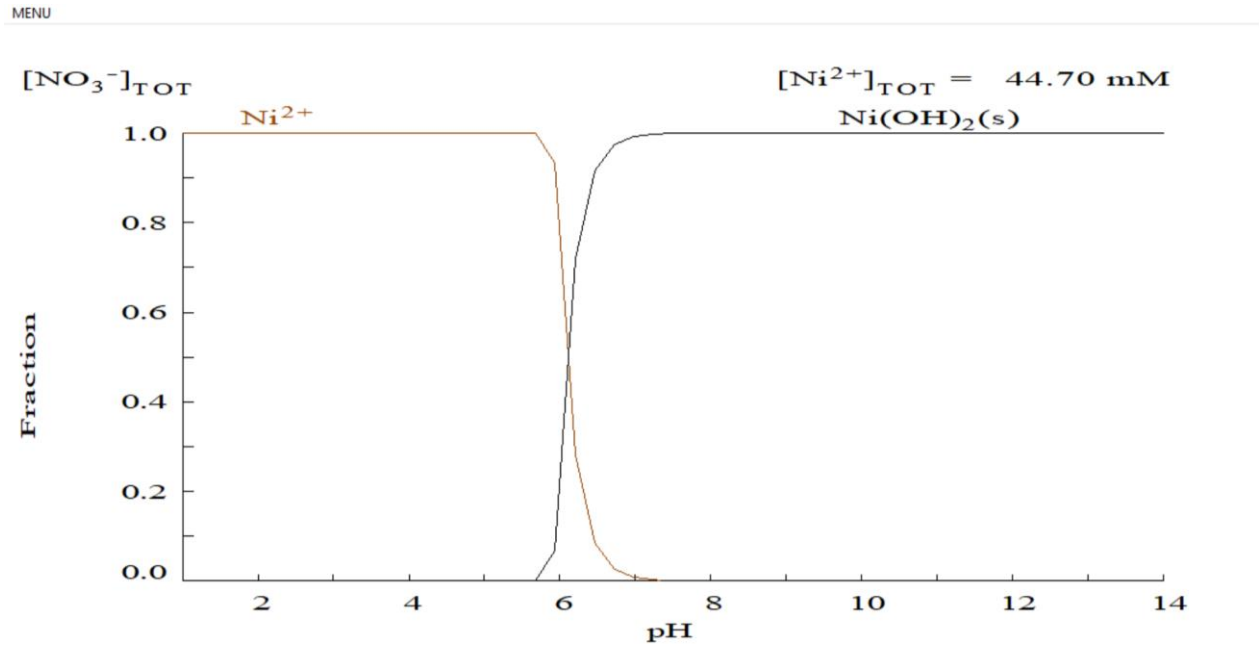



Como siguiente paso, damos clic en "Diagram" en la esquina superior izquierda de la ventana. El programa realizará los cálculos necesarios para generar un diagrama de tipo logarítmico. Una vez finalizados los cálculos, el diagrama se mostrará en una ventana de la siguiente manera.



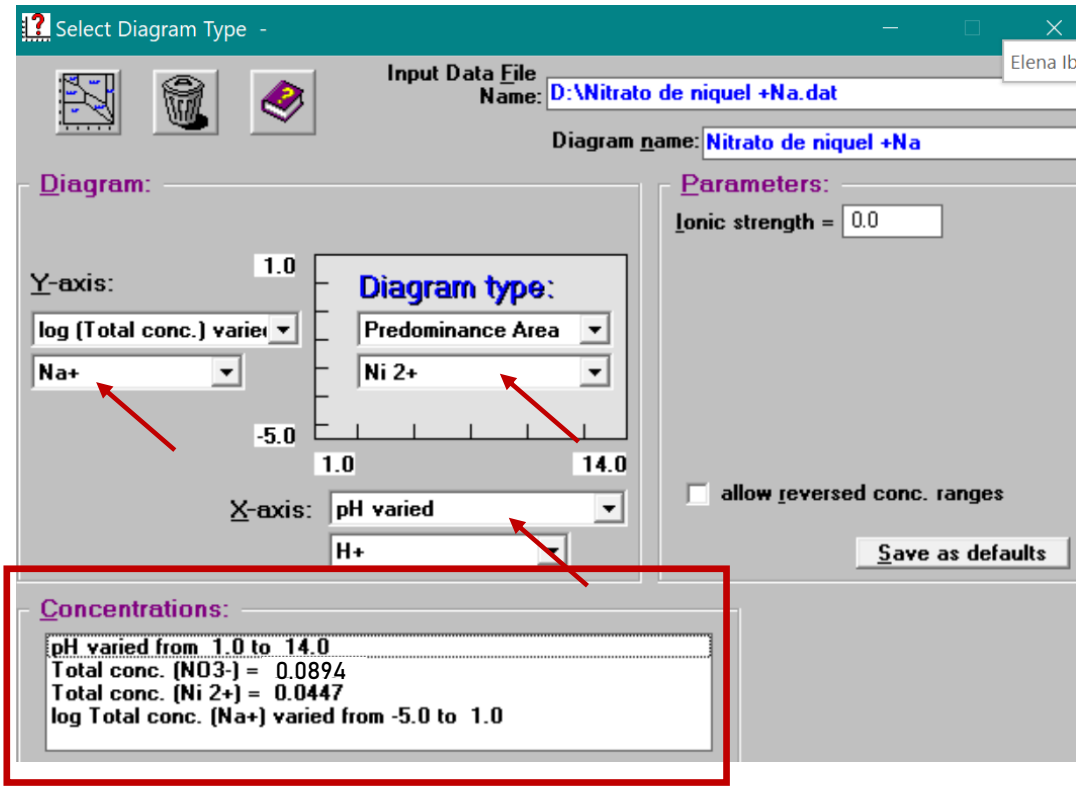

Para crear un diagrama del tipo Fracción vs pH, cierre esa venta y siga los puntos siguientes de esa *Sección 2.3 de la Metodología*. Haga clic en el botón “Diagram” en la esquina superior izquierda de la ventana, los cálculos serán realizados por el programa para crear un diagrama del

tipo fracción. Cuando los cálculos hayan terminado, el diagrama será mostrado en una ventana de la siguiente manera.

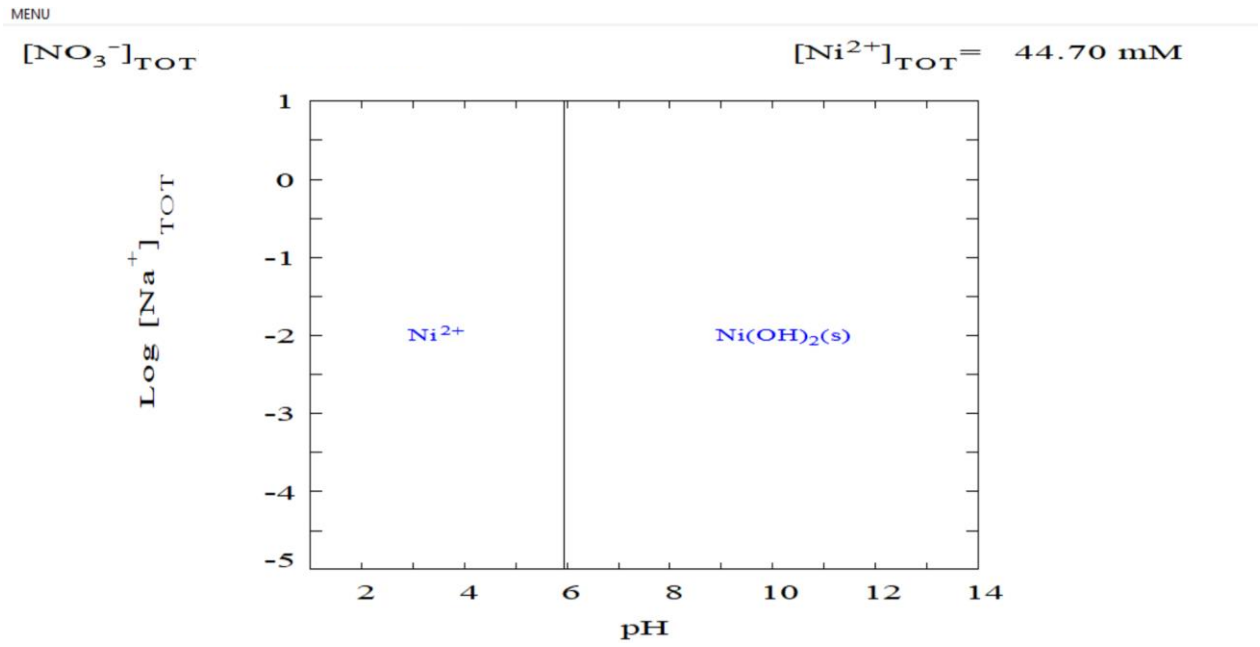



## 3.2 Efecto del pH alcalino en el nitrato de níquel II en solución

Para analizar el comportamiento del nitrato de níquel (II) en solución bajo condiciones de pH alcalino, introduciremos en Hydra los datos de la sección anterior, utilizando una molaridad de 0.0447 para $Ni^{2+}$ y 0.0894 para $NO^{3-}$, junto con hidróxido de sodio 1 M. Seguiremos los pasos descritos en la *Sección 2.4 de la Metodología*, reemplazando el zinc por níquel. Es importante revisar cuidadosamente que las concentraciones estén correctamente ingresadas antes de generar el diagrama, así como se muestra en la imagen siguiente. Los cálculos serán realizados por el programa para crear un diagrama del tipo “Predominance Area” (Área de predominancia).



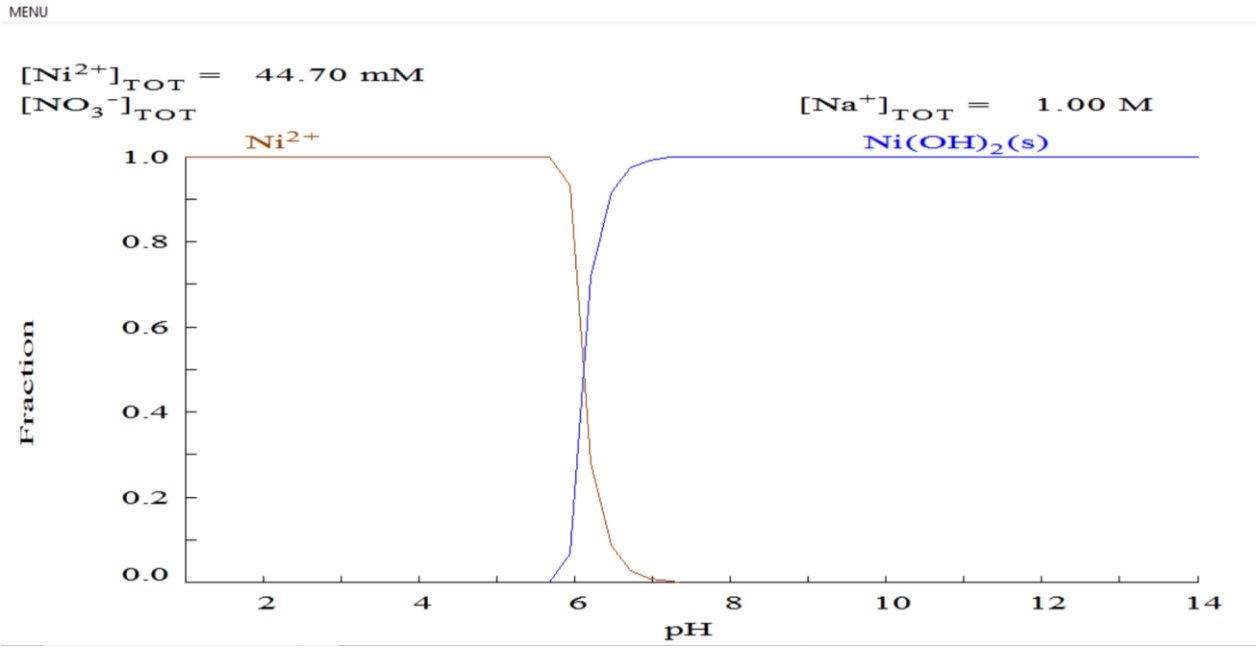

Cuando los cálculos hayan terminado, el diagrama será mostrado en una ventana de la siguiente manera.




Para crear un diagrama de tipo Fracción, cierre la ventana actual y continúe con los pasos indicados en la *Sección 2.4 de la Metodología.* Asegúrese de que las concentraciones estén

correctamente establecidas en 0.0447 M para el ion Ni2+ y 0.0894 para NO3- y 1 M para Na+ antes de proceder.

Cuando los cálculos hayan terminado, el diagrama será mostrado en una ventana de la siguiente manera.




## 3.3 Preparación de soluciones para la precipitación de hidróxido de níquel II

Para corroborar los resultados predichos por los diagramas de equilibrio químico generado con el software HYDRA-MEDUSA, se llevó a cabo una segunda serie de experimentos prácticos, utilizando nitrato de níquel II hexahidratado. El objetivo de este experimento fue observar la precipitación del hidróxido de níquel II a partir de una solución de nitrato de níquel, mediante la adición gradual de una solución de hidróxido de sodio 1 molar.

### *Preparación de la solución de nitrato de níquel (II)*

Se peso 1.3 g de nitrato de níquel (II) hexahidratado utilizando una balanza analítica. El nitrato de níquel se disolvió en 100 mL de agua destilada en un vaso de precipitado de 250 mL, bajo agitación constante para asegurar la completa disolución del soluto. La solución resultante fue una solución verde de nitrato de níquel. Antes de la adición de hidróxido de sodio, se midió el pH de la solución, obteniéndose un valor de 5.33.

### *Adición de hidróxido de sodio y precipitación del hidróxido de níquel (II)*

Posteriormente, se inició la adición gradual de una solución de hidróxido de sodio 1 M a la solución de nitrato de níquel, manteniendo una agitación constante y una temperatura ambiente de aproximadamente 25°C. La adición del NaOH se realizó de manera controlada, monitoreando el pH con un pH-metro, para asegurar una mezcla homogénea y evitar sobresaturación local, se registró un pH final de 8.11 tras la adición de 11 ml del hidróxido de sodio, lo cual indica la formación esperada del precipitado de hidróxido de níquel (II).

Este procedimiento replicó la metodología utilizada en la experimentación previa con nitrato de zinc, permitiendo así una comparación directa de los resultados obtenidos con diferentes metales y validando la precisión de los diagramas de equilibrio generados con HYDRA-MEDUSA.

# 4. CASO NITRATO DE ALUMINIO NONAHIDRATADO $Al(NO_3)_3 \cdot 9\ H_2O$

## 4.1 Generación de diagramas de equilibrio para la experimentación con nitrato de aluminio

Para desarrollar el diagrama de equilibrio químico para el caso del nitrato de aluminio, seguiremos los pasos descritos en las *Secciones 2.1, 2.2, 2.3 y 2.4 de la Metodología,* con la diferencia será que, en lugar de utilizar nitrato de zinc, para este caso se empleará nitrato de aluminio nonahidratado $Al(NO_3)_3 \cdot 9\ H_2O$.

Tal como se detalla en la *Sección 2.2*, es importante determinar la concentración de cada ion (molaridad). Finalmente, obtendremos tanto el diagrama de equilibrio químico logarítmico como el diagrama de fracción de especies para el sistema estudiado.

### *Concentración de cada ion (molaridad) caso nitrato de aluminio*

Se determinó la concentración de cada ion en 2.5 gramos de con nitrato de aluminio nonahidratado, disuelto en 100 mL de agua desionizada. Para ello, se siguieron meticulosamente los pasos descritos en la *sección 2.2*, aplicando cada fórmula correspondiente. Como resultado, se obtuvo la **Error! Reference source not found.**.

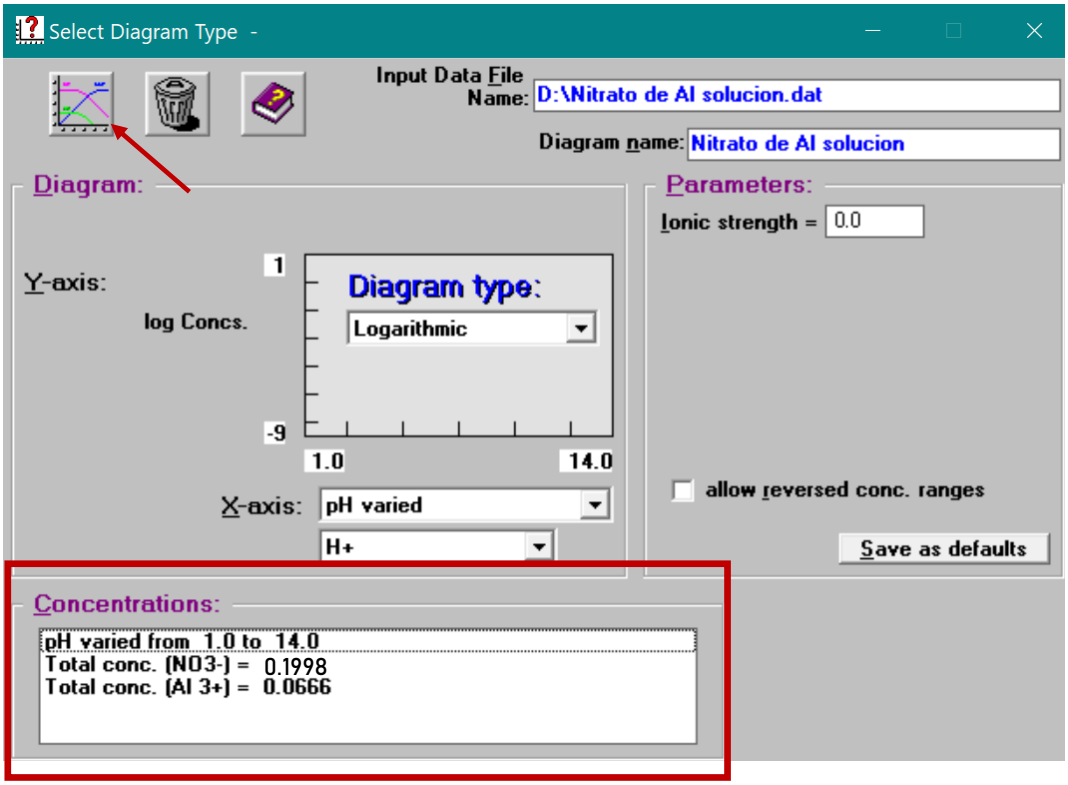
***Tabla 5 Desglose de las masas elementales del nitrato de aluminio nonahidratado***

| Átomo | # de moléculas | Peso molecular (PM) (g/mol) | Subtotal de peso molecular (g/mol) | Subtotal de peso molecular (%) | Masa en gramos (M) (g) | Molaridad (Moles/L) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| **Al** | 1 | 26.98 | 26.98 | 7.19 | 0.17975 | 0.0666 |
| **$NO_3$** | 3 | 62.01 | 186.03 | 49.59 | 1.2395 | 0.1998 |
| **$H_2O$** | 9 | 18.016 | 162.144 | 43.23 | 1.08075 | 0.5994 |
| **Total** | | | **375.154** | **100** | **2.5** | |

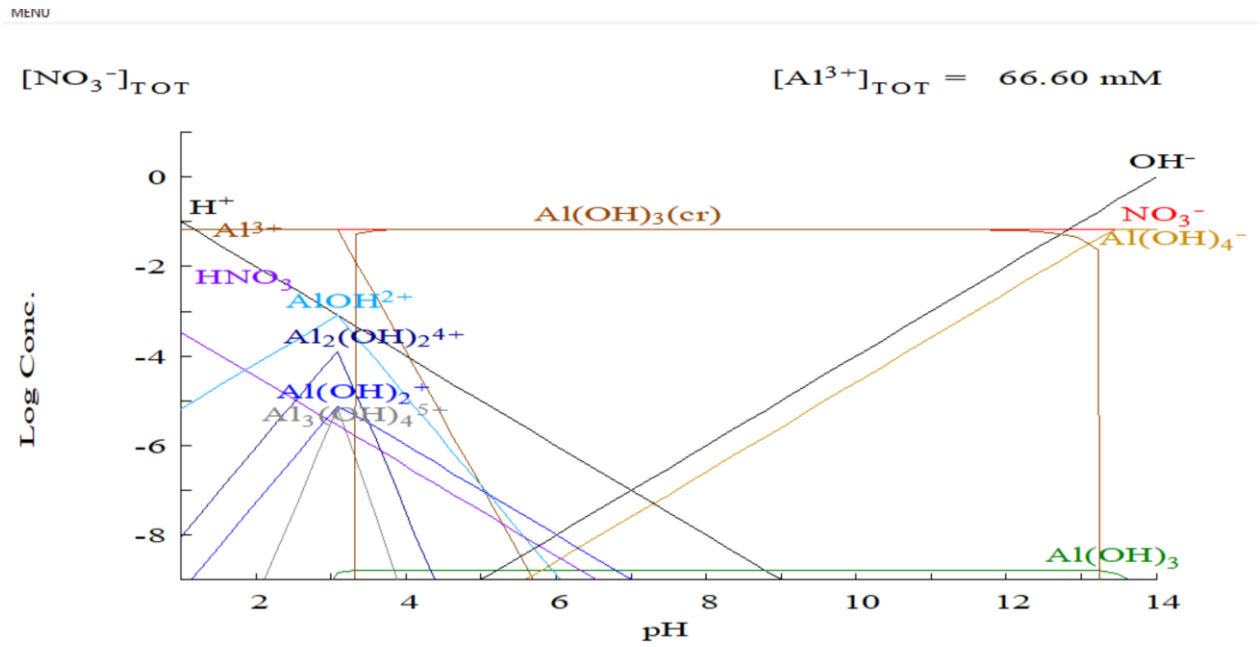
### *Generación de diagramas de equilibrio caso Nitrato de Aluminio*

Una vez obtenidas las concentraciones para cada ion en 2.5 gramos de nitrato de aluminio nonahidratado, procedemos a ingresar los datos en el programa para construir los diagramas de equilibrio químico, siguiendo los pasos descritos en las *Secciones 2.1 y 2.3 de la Metodología*. La única diferencia es que, en lugar de ingresar zinc, debemos ingresar aluminio (Al). Es importante

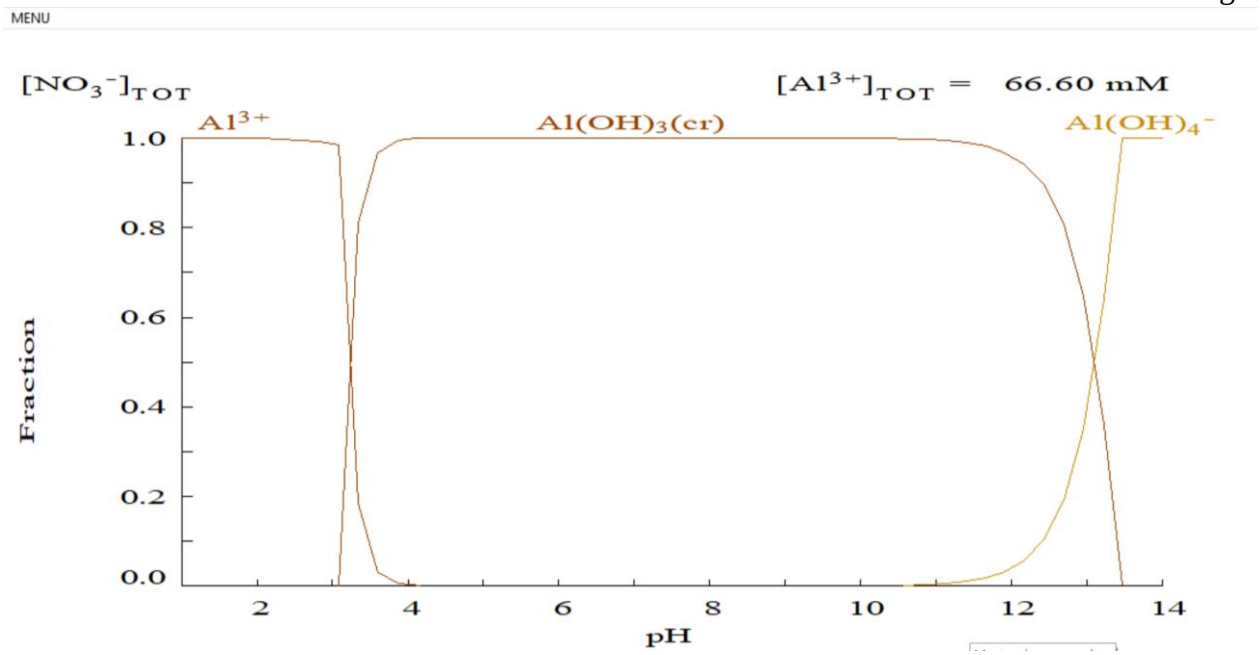
revisar que las concentraciones estén correctamente introducidas en el programa antes de elaborar los diagramas, tal como se indica en la imagen siguiente en “concentrations”.



Como siguiente paso, damos clic en "Diagram" en la esquina superior izquierda de la ventana. El programa realizará los cálculos necesarios para generar un diagrama de tipo logarítmico. Una vez finalizados los cálculos, el diagrama se mostrará en una ventana de la siguiente manera.

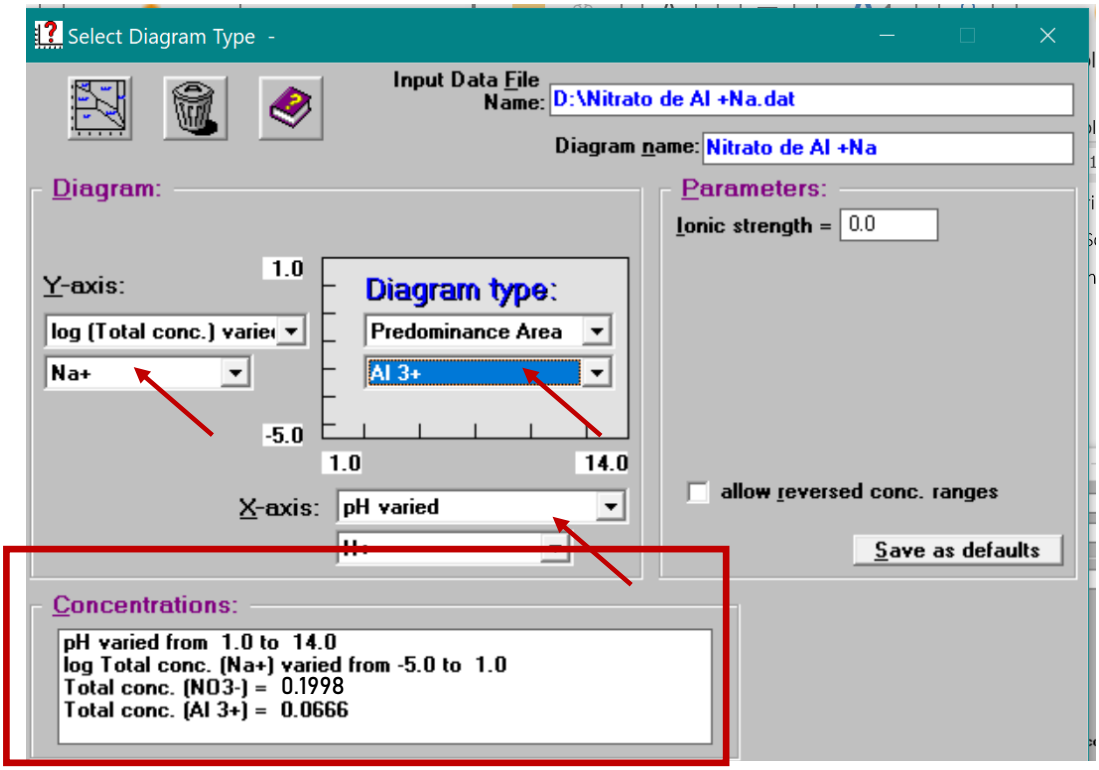



Para crear un diagrama del tipo Fracción vs pH, cierre esa venta y siga los puntos siguientes de esa *Sección 2.3 de la Metodología*. Haga clic en el botón “Diagram” en la esquina superior izquierda de la ventana, los cálculos serán realizados por el programa para crear un Diagrama del tipo fracción. Cuando los cálculos hayan terminado, el diagrama será mostrado en una ventana de la siguiente manera.

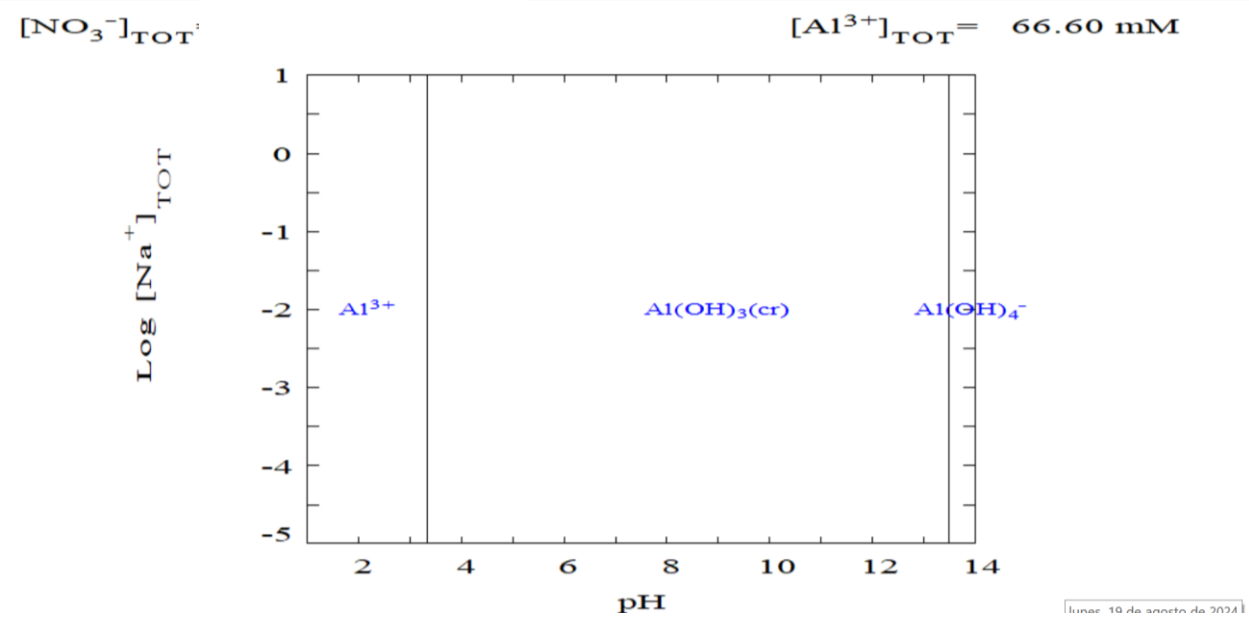



## 4.2 Efecto del pH alcalino en el nitrato de aluminio en solución

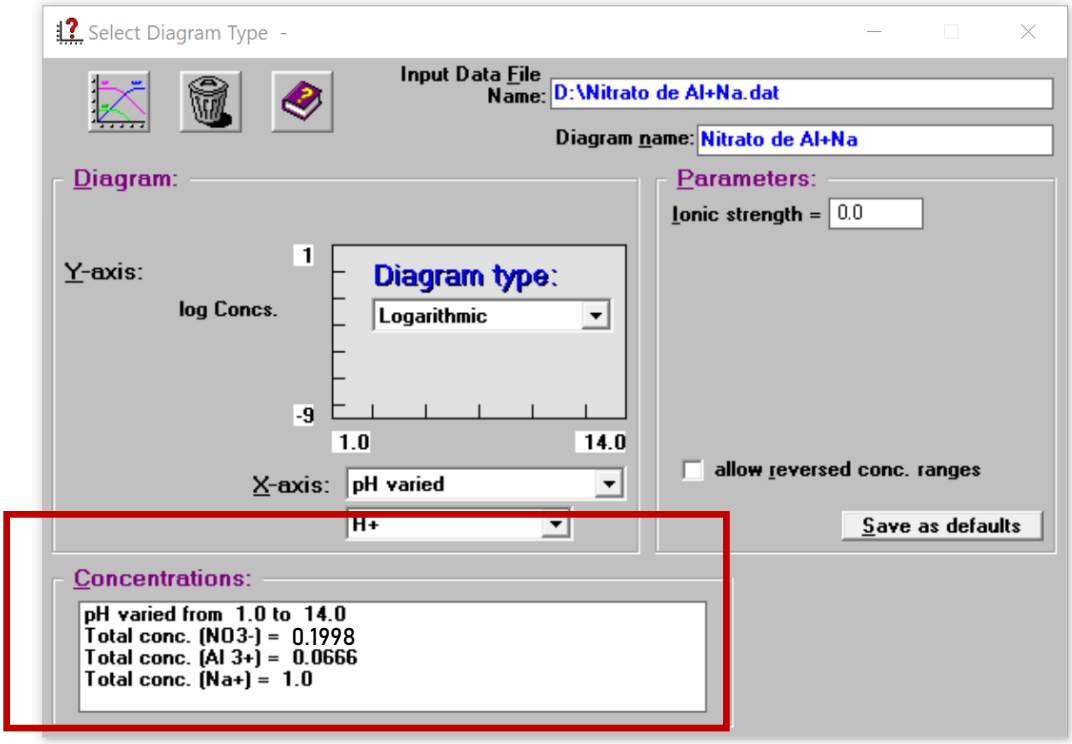
Para analizar el comportamiento del nitrato de aluminio en solución bajo condiciones de pH alcalino, introduciremos en Hydra los datos de la sección anterior, utilizando una molaridad de 0.0666 para Al y 0.1998 para el ion $NO^{3-}$, junto con hidróxido de sodio 1 M. Seguiremos los pasos descritos en la *Sección 2.4 de la Metodología*, reemplazando el zinc por aluminio. Es importante revisar cuidadosamente que las concentraciones estén correctamente ingresadas antes de generar el diagrama, así como se muestra en la imagen siguiente. Los cálculos serán realizados por el programa para crear un diagrama del tipo “Predominance Area” (Área de predominancia).



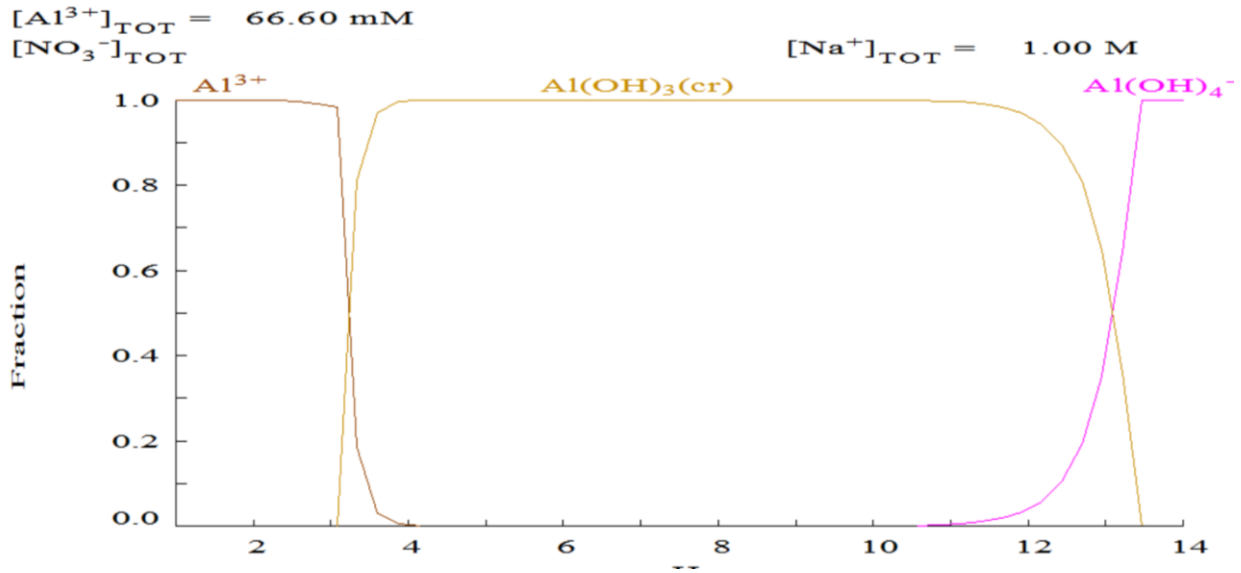

Cuando los cálculos hayan terminado, el diagrama será mostrado en una ventana de la siguiente manera.



Para crear un diagrama de tipo Fracción, cierre la ventana actual y continúe con los pasos descritos en la *Sección 2.4 de la Metodología*. Asegúrese de que las concentraciones estén correctas en 0.0666 M para Al3+ , 0.1998 para NO3- y 1 M para Na+ antes de proceder a graficar.




Cuando los cálculos hayan terminado, el diagrama será mostrado en una ventana de la siguiente manera.




## 4.3 Preparación de soluciones para la precipitación de hidróxido de aluminio

Para corroborar los resultados predichos por los diagramas de equilibrio químico generado con el software HYDRA-MEDUSA, se realizó una tercera serie de experimentos prácticos, utilizando nitrato de aluminio nonahidratado. El objetivo fue observar la precipitación del hidróxido de aluminio a partir de una solución de nitrato de aluminio nonahidratado, mediante la adición gradual de una solución de hidróxido de sodio 1 molar.

### *Preparación de la Solución de nitrato de aluminio*

Se pesaron 2.5 g de nitrato de aluminio nonahidratado utilizando una balanza analítica. El nitrato de aluminio se disolvió en 100 mL de agua destilada en un vaso de precipitados de 250 mL, bajo agitación constante para asegurar la completa disolución del soluto. La solución resultante fue una solución acuosa clara de nitrato de aluminio. Antes de la adición de hidróxido de sodio, se midió el pH de la solución, obteniéndose un valor de 2.91.

### *Adición de Hidróxido de Sodio y Precipitación del Hidróxido de Aluminio*

Posteriormente, se inició la adición gradual de una solución de hidróxido de sodio 1 M a la solución de nitrato de aluminio, manteniendo una agitación constante y una temperatura ambiente de aproximadamente 25°C. La adición del NaOH se realizó de manera controlada,

monitoreando el pH con un pH-metro, para asegurar una mezcla homogénea y evitar sobresaturación local, se registró un pH final de 7.12 tras la adición de 20 mL de del hidróxido de sodio, lo cual indica la neutralización de la solución y la formación esperada del precipitado de hidróxido de aluminio.

Este procedimiento replicó la metodología utilizada en las experimentaciones previas con nitrato de zinc y nitrato de níquel II, permitiendo así una comparación directa de los resultados obtenidos con diferentes metales y validando la precisión de los diagramas de equilibrio generados con HYDRA-MEDUSA.

# Resultados y discusión

# 1. CASO NITRATO DE ZINC HEXAHIDRATADO $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$

En el capítulo anterior, *Metodología,* se ha utilizado el software HYDRA-MEDUSA para generar diagramas de equilibrio químico que permiten predecir las especies químicas presentes en soluciones acuosas. Las sales seleccionadas fueron el nitrato de zinc hexahidratado ($Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$), nitrato de níquel (II) hexahidratado ($N_2(NiO_3)_2 \cdot 6H_2O$ y nitrato de aluminio nonahidratado ($Al(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$) como compuestos de estudio, se construyeron los diagramas de especiación de cada uno, se obtuvieron los precipitados y se caracterizaron.

## 1.1 Discusión de los diagramas de equilibrio caso nitrato de zinc

Para la generación de los diagramas de equilibrio del caso nitrato de zinc, se consideraron 1.5 gramos de nitrato de zinc hexahidratado en 100 ml de agua desionizada. Según los resultados obtenidos en la tabla 3, determinados en la *Sección 2.2 de la Metodología*, (se recomienda ver esta sección) la molaridad de los iones zinc y nitrato es de 0.0504 y 0.1008 M respectivamente en 1.5 gramos del compuesto.

A continuación, se presentan los diagramas de equilibrio químico tipo logarítmico, el diagrama equilibrio químico tipo Fracción, es decir pH vs. Fracción de especies y el diagrama de especiación del tipo "Área de predominancia" con el objetivo de discutir los resultados obtenidos.

### *Diagrama equilibrio químico tipo logarítmico*

En el diagrama de la *Fig. 1* se muestra un diagrama de especiación tipo logarítmico, pH vs Fracción, del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$, a concentraciones de 0.0504 M de $Zn^+$ y 0.1008 M de $NO_3^-$. El logaritmo de la concentración de cada una de las especies, tanto las especies elegidas para graficar el diagrama como las que puedan formarse, en función del pH, en una solución nitrato de zinc. Es importante señalar que, en el logaritmo de la concentración representado en el eje de las ordenadas, está en escala logarítmica, en un rango de -10 a 0, en donde 0 es igual a 1 Molar y -10 es igual $1x10^{-10}$ Molar

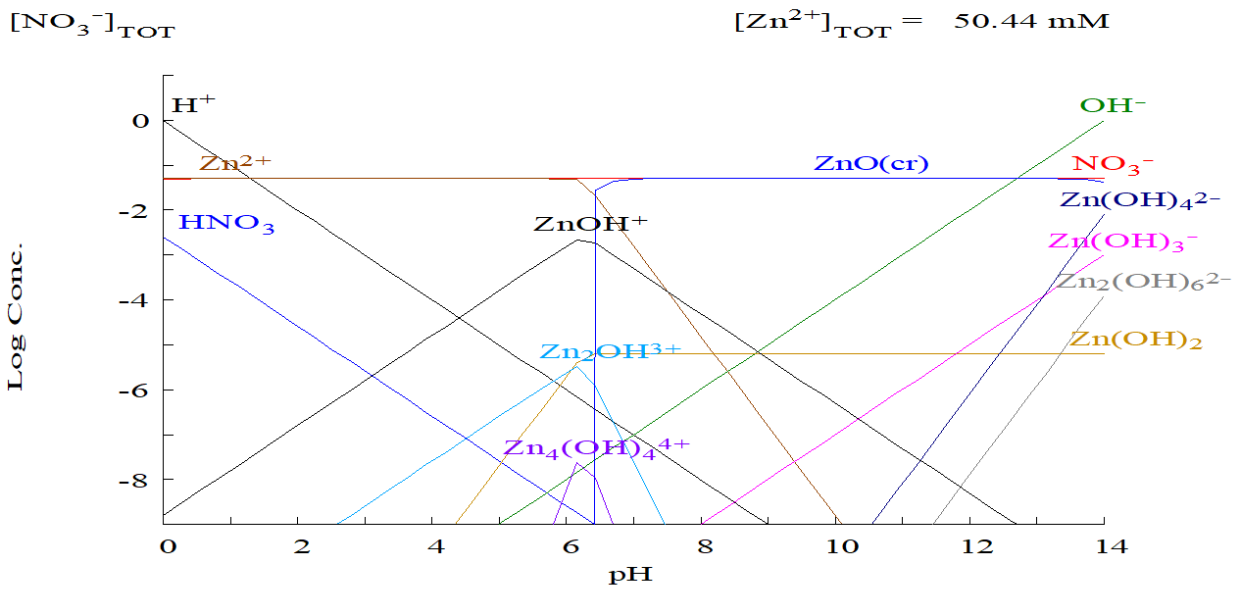



***Fig. 1 Diagrama de especiación tipo logarítmico, pH vs Fracción, del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$, a concentraciones de 0.0504 M de Zn+ y 0.1008 M NO3-.***

## *Especies presentes en el diagrama logarítmico del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$*

**a)** **$Zn^{2+}$:** A valores muy ácidos de pH, el ion zinc $Zn^{2+}$ es la especie predominante en solución. Esto se debe a que, en condiciones ácidas, el zinc permanece en su forma iónica simple debido a la abundancia de protones $H^+$, que impiden la formación de especies hidroxiladas. En el diagrama, la curva de $Zn^{2+}$ es dominante en la región ácida, lo que refleja la estabilidad del zinc en su forma iónica en este rango de pH.

**b)** **$Zn(OH)^+$**: A medida que el pH aumenta, los iones hidróxidos $OH^-$ comienzan a reaccionar con $Zn^{2+}$ para formar el complejo $Zn(OH)^+$, esta especie comienza a aparecer en el diagrama a partir de pH 6. El cruce entre las curvas de $Zn^{2+}$ y $Zn(OH)^+$, indica el pH en el que ambas especies tienen concentraciones iguales, marcando el inicio de la predominancia de $Zn(OH)^+$ a pH más altos.

**c)** **$Zn(OH)_2$:** En un rango de pH cercano a 4.5, se forma $Zn(OH)_2$ que es un precipitado sólido. Este precipitado limita la solubilidad del zinc, indicando que, en condiciones moderadamente básicas, el zinc tiende a precipitar en forma de hidróxido de zinc. La curva correspondiente a $Zn(OH)_2$ en el diagrama muestra la reducción de la concentración de zinc libre en solución a medida que se precipita

d) **$Zn(OH)_3^-$ y $Zn(OH)_4^{2-}$:** A valores de pH alcalinos, las especies aniónicas $Zn(OH)_3^-$ y $Zn(OH)_4^{2-}$ comienzan a predominar. Estas especies se forman cuando el zinc reacciona con un exceso de iones hidróxidos, manteniéndose en solución en forma de complejos solubles. En el diagrama, estas especies aparecen en el extremo básico, reflejando la estabilidad de los complejos hidroxilados del zinc bajo condiciones fuertemente alcalinas.

e) **$ZnO_{(cr)}$:** A un pH cercano a 6.5, comienza a formarse ZnO en su fase cristalina, lo que indica que, en condiciones básicas, el zinc tiende a precipitar como óxido de zinc (ZnO). Esta transición refleja la estabilidad de ZnO en soluciones con pH más elevado.

## *Interpretación del diagrama logarítmico del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$*

La representación de todas las especies en un único diagrama permite identificar claramente los rangos de pH en los que cada una es predominante. En el caso del zinc:

El comportamiento del zinc en solución acuosa depende fuertemente del pH, con distintas especies predominando en diferentes rangos de pH. A valores de pH ácidos (condiciones muy ácidas), el zinc permanece principalmente como ion simple $Zn^{2+}$. A medida que el pH aumenta, se observa la formación de complejos hidroxilados como $Zn(OH)^+$, seguido por la precipitación de ZnO y la formación de especies más complejas como $Zn(OH)_3^-$ y $Zn(OH)_4^{2-}$ en condiciones alcalinas.

A un pH cercano a 4.5, comienza la precipitación de $Zn(OH)_2$, lo que indica una disminución en la solubilidad del zinc a medida que el pH se vuelve más básico. Esto refleja una transición en la química del zinc desde una fase predominantemente soluble a una en la que el zinc tiende a precipitar.

En condiciones ligeramente básicas (pH cercano a 6.5), inicia la precipitación del Zn como óxido de zinc (ZnO), lo que muestra que, bajo estas condiciones, ZnO es la fase más estable y menos estable.

Las distintas especies de zinc se forman debido a las interacciones con iones hidróxido en solución, lo que indica una fuerte dependencia de la concentración de $OH^-$ y del pH. Cada especie

tiene un rango de pH en el que es más estable, lo que sugiere que, para controlar la química del zinc en un sistema, es esencial ajustar cuidadosamente el pH para promover la formación de la especie deseada.

El diagrama no solo muestra las especies predominantes a diferentes niveles de pH, sino que también proporciona información sobre la estabilidad de diferentes especies del zinc. Específicamente, se observa que no se forman nitratos de zinc en el diagrama, lo que sugiere una buena opción para obtener $ZnO_{(cr)}$ ya que el nitrato de zinc no es estable bajo las condiciones representadas. Esto concuerda con la naturaleza de los nitratos, que suelen estar completamente disociados en solución acuosa.

Finalmente, se señala que el uso de una escala logarítmica en el diagrama permite una visualización más clara de las concentraciones de las diferentes especies en función del pH, abarcando un rango amplio de concentraciones (desde 1 M hasta $1x10^{-10}$ M), las cuales pueden ser modificadas en el momento de realizar el diagrama. Lo expresado anteriormente es importante para entender la predominancia relativa de cada especie en función del pH y cómo pequeñas variaciones en pH pueden resultar en cambios significativos en la forma en que el ion zinc y el ion nitrato se comportan en solución.

## *Diagrama equilibrio químico tipo Fracción*

El diagrama de especies pH vs. Fracción del sistema $Zn^{2+}/NO_3^-$, generado por el software HYDRA-MEDUSA y mostrado en la ***Error! Reference source not found.***, permite visualizar la distribución de las especies presentes en solución en función del pH, proporcionando información sobre las condiciones en las que predominan ciertos iones o compuestos precipitados.

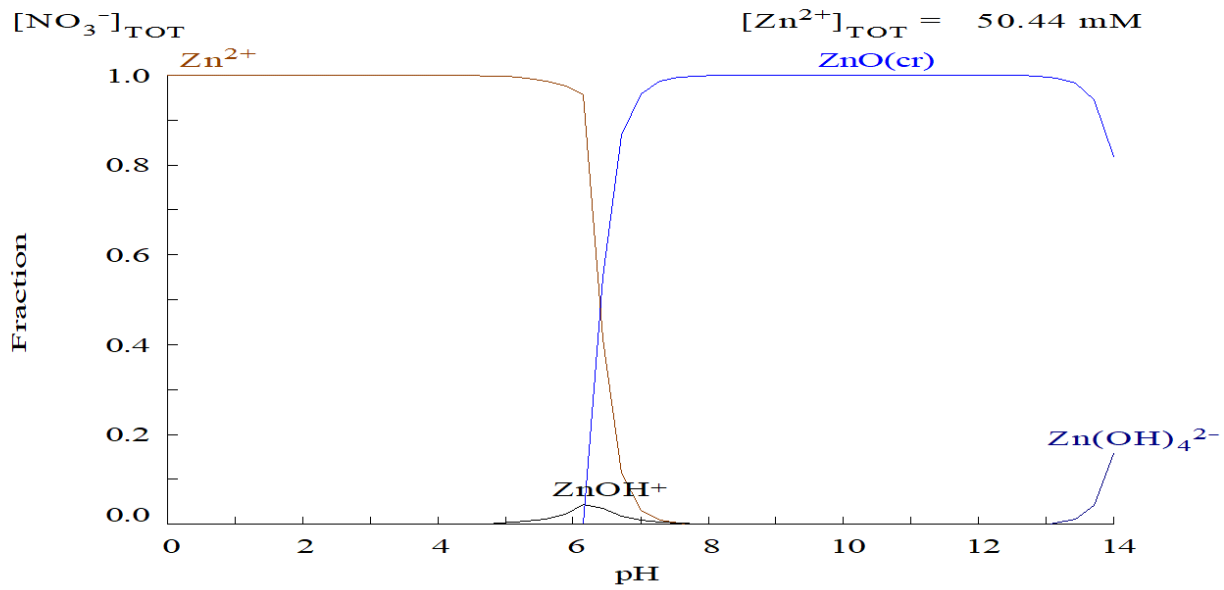



***Fig. 2 Diagrama de especiación tipo Fracción, pH vs Fracción, del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$, a concentraciones de 0.0504 M de $Zn^{2+}$ y 0.1008 M de $NO_3^-$.***

El diagrama muestra que, en un rango de pH de 0 a 4.8, la especie dominante es el ion zinc ($Zn^{2+}$), con una fracción de 1 (es decir, 100% de $Zn^{2+}$). Esto se debe a que, en condiciones ácidas o ligeramente neutras, los iones de zinc no encuentran suficientes iones hidróxido para formar hidróxido de zinc. La disociación del nitrato de zinc en agua se describe por la siguiente ecuación:

$$\boldsymbol{Zn(NO_3)_{2(ac)} \rightarrow Zn^{2+}{}_{(ac)} + 2NO_3^-} \qquad \textbf{( 41 )}$$

En este intervalo de pH, la solubilidad y estabilidad de los iones metálicos se incrementan debido a la presencia de protones, lo que mantiene los aniones en forma de agua y evita la formación de compuestos insolubles.

A medida que el pH aumenta, entre 4.8 y 7.7, coexisten tres especies: el ion zinc ($Zn^{2+}$), el catión de hidróxido de zinc ($ZnOH^+$) (como especie minoritaria), y el óxido de zinc ($ZnO_{(cr)}$) como especie sólida precipitada en forma de cristales. A pH alcalino, el óxido de zinc es más favorecido que el hidróxido de zinc, según la siguiente ecuación.

$$Zn^{2+}_{(aq)} + 2OH^-_{(aq)} \rightarrow ZnO_{(s)} + H_2O_{(l)} \quad (42)$$

En efecto, el investigador Wahab en 2019, llevó a cabo la síntesis de ZnO modificando el pH de la solución entre valores de 6 y 12. Sin embargo, no reportó el rendimiento de las reacciones, y sus patrones de difracción a pH 6 revelaron la presencia de impurezas. Los resultados de las impurezas mostradas en DRX a un valor de pH de 6, pueden estar indicando la formación de especies de compuestos de Zn debido a que no se ha alcanzado la formación total del ZnO *(Wahab, 2009).* Al analizar el pH 7, se observa la coexistencia de varias especies: $Zn^+$, $ZnOH^+$ y ZnO. El diagrama en este pH muestra las fracciones correspondientes a cada una, con un valor de 0.2 para $ZnOH^+$, 0.5 para $Zn^+$ y 0.93 para ZnO. La suma de las fracciones de estas tres especies es igual a uno.

Por otra parte, el ion zinc ($Zn^{2+}$) presente en la solución puede reaccionar con los iones hidróxido ($OH^-$) según la siguiente reacción:

$$\mathbf{Zn^{2+} + H^+ + OH^- \rightarrow ZnOH^+ + H^+} \quad (43)$$

$$\boldsymbol{Zn^{2+} + OH^- \rightarrow ZnOH^+} \quad (44)$$

Estas reacciones químicas dependen tanto de las concentraciones de los iones zinc y nitrato, como del pH de la solución.

A partir de un pH de aproximadamente 6.2 y hasta más de 14, se observa la formación de óxido de zinc como precipitado dominante. Esto indica que, a medida que el pH aumenta hacia valores más alcalinos, la solubilidad del zinc disminuye y el compuesto se precipita, predominando en la solución. También, en un pH de 13 en adelante, surge otra especie, $Zn(OH)_4^{2-}$ , la cual se convierte en dominante en medios extremadamente alcalinos, donde el metal se coordina con múltiples iones hidróxido, aumentando su solubilidad. Esto es debido a que el zinc es anfótero y puede reaccionar con los $OH^-$ del medio.

Este análisis confirma la eficacia del software utilizado para predecir la distribución de especies en función del pH. La presencia de iones zinc en soluciones ácidas, la precipitación de óxido de zinc en medios neutros a ligeramente alcalinos, y la formación de complejos hidroxilados en pH altamente alcalinos son coherentes con la química bien establecida de este compuesto.

El diagrama de tipo fracción proporciona una visualización clara de cómo se distribuyen las especies de zinc en función del pH, lo que facilita la interpretación de las condiciones óptimas para su manejo en soluciones acuosas. Este análisis refuerza la utilidad de los diagramas de equilibrio químico generados con el software y demuestra su aplicabilidad en la predicción y control de reacciones químicas en distintos entornos.

## 1.2 Efecto del pH alcalino en el nitrato de zinc en solución

El pH alcalino destaca en la transformación del nitrato de zinc hexahidratado en óxido de zinc. Para obtener óxido de zinc, es necesario alcalinizar la solución mediante la adición de una base, en este caso hidróxido de sodio, debido a su eficacia, disponibilidad y bajo costo.

La elección de la base promueve la precipitación de óxido de zinc, que ocurre cuando el pH supera el valor crítico donde la solubilidad del zinc disminuye drásticamente. Sin embargo, este proceso no está exento de complejidades. La disociación de NaOH genera iones sodio ($Na^+$) e hidróxido ($OH^-$), que pueden interactuar con las especies de zinc. Por lo tanto, es fundamental evaluar si el ion $Na^+$ puede influir en la formación de compuestos no deseados, como complejos solubles, que podrían alterar la eficiencia de la precipitación del óxido de zinc.

En múltiples investigaciones, se ha trabajado en la síntesis de partículas y nanopartículas de óxido de zinc (ZnO) empleando diversos métodos y variando el pH de la solución para precipitar el material. Abdulrahman y colaboradores investigaron el efecto del pH en la formación de nanoestructuras de óxido de zinc mediante deposición química en fase de vapor a baja temperatura, utilizando burbujas de aire para mejorar el proceso. Observaron que, al incrementar el pH, la orientación preferencial del material se dirigía hacia el plano (002), con tamaños cristalinos que oscilaban alrededor de 36.4 nanómetros *(Abdulrahman, 2021).*

Por otro lado, Sheikhi empleó nitrato de zinc y acetato de zinc como precursores, utilizando hidróxido de sodio como agente modificador de pH. Sus resultados mostraron que la morfología del ZnO variaba significativamente en función del pH de precipitación, evaluado a valores de 9, 11 y 13 *(Sheikhi, 2022).*

Chen logró sintetizar partículas pseudoesféricas de ZnO utilizando nitrato de zinc y nitrato de amonio como reactivos principales, mientras que Ghorbani y su equipo sintetizaron nanopartículas de ZnO con tamaños promedio de 20 nanómetros a partir de acetato de zinc e hidróxido de potasio como modificador de pH (Chen, 2008) *(Ghorbani, 2015).*

El software HYDRA-MEDUSA permite prever estas interacciones y visualizar cómo diferentes especies predominan en función del pH. El diagrama de especies de pH vs. Fracción generado para el sistema $Zn^{2+}/NO^{3-}/Na^{+}$ de la ***Error! Reference source not found.*** muestra claramente las fases y especies presentes a lo largo del rango de pH. Este análisis es esencial para asegurar que la alcalinización con NaOH conduzca efectivamente a la precipitación del óxido de zinc, sin la formación de subproductos no deseados que puedan comprometer la pureza o el rendimiento del proceso.

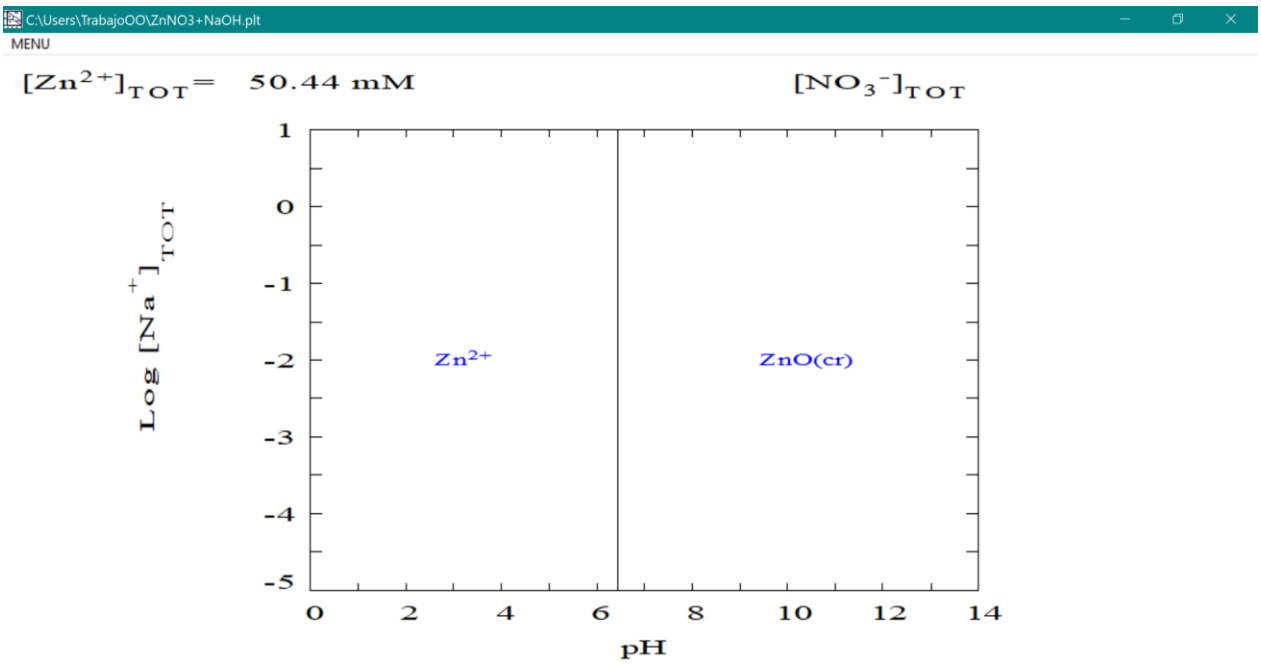



***Fig. 3 Diagrama de especiación del tipo predominance area, pH vs Fracción, del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$/ $Na^+$.***

El diagrama de la ***Error! Reference source not found.*** muestra que, en un amplio rango de concentraciones de $Na^+$ comprendido entre 1 M y $10^{-5}$ M, solo se encuentran dos especies predominantes: el ion zinc ($Zn^{2+}$) y el óxido de zinc ($ZnO_{(cr)}$), este último en su forma cristalina precipitada.

En condiciones ácidas a neutras, el ion zinc es la especie dominante. A medida que el pH aumenta hacia valores más alcalinos, el $ZnO_{(cr)}$ comienza a formarse y a predominar en la solución, desplazando al ion zinc libre. El hecho de que solo se presenten $Zn^{2+}$ y el $ZnO_{(cr)}$ en todo el rango de concentraciones de sodio, sugiere que no se forman especies intermedias o complejos con sodio que pudieran interferir en la precipitación del óxido de zinc. Esto simplifica el control del proceso, ya que asegura que, al ajustar el pH, se puede obtener óxido de zinc puro sin la aparición de compuestos secundarios.

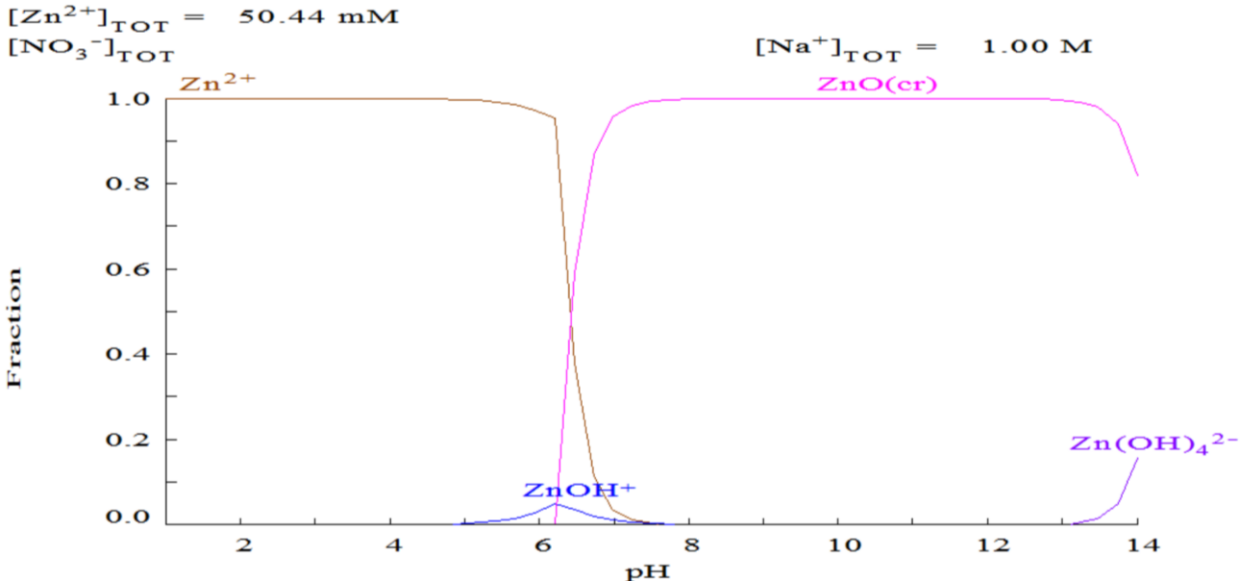



***Fig. 4 Diagrama de especiación del tipo Fracción, pH vs Fracción del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$/ $Na^+$, a una concentración 1M de NaOH y a concentraciones de 0.0504 M de $Zn^{2+}$ y 0.1008 M de $NO_3^-$.***

## 1.3 Obtención de ZnO en el laboratorio

En la *Sección 2.5 de la Metodología*, se describió el procedimiento para la disolución del nitrato de zinc hexahidratado y la adición gradual de una solución de hidróxido de sodio. Este proceso es importante para observar y analizar las especies químicas presentes en diferentes condiciones de pH, de acuerdo con las predicciones realizadas mediante el software HYDRA-MEDUSA.

Al disolver 1.5 g de nitrato de zinc hexahidratado en 100 mL de agua destilada, se obtuvo una solución translúcida. Esta translucidez, indica la completa disolución de los iones $Zn^{2+}$ y $NO_3^-$ en el agua, lo cual es consistente con el comportamiento esperado en soluciones acuosas. El pH inicial de la solución, medido en 5.6, se encuentra dentro del rango donde, según el diagrama de ***Error! Reference source not found.***, predominan los iones zinc disueltos. Este resultado confirma las predicciones del software, que indicaban la estabilidad de $Zn^{2+}$ en medios ácidos.

Al aumentar el pH por encima de este punto crítico mediante la adición de NaOH, comenzamos a observar la formación de hidróxido de zinc, este fenómeno ocurre porque al incrementarse la concentración de iones ($OH^-$), el equilibrio se desplaza, favoreciendo la formación de $Zn(OH)^+$. Este cambio es visible en el diagrama de especies, donde la aparición de $ZnOH^+$ y ZnO se vuelve más notable a medida que el pH alcanza valores neutros a alcalinos.

Posteriormente, a valores de pH alcalinos, la conversión del hidróxido de zinc en óxido de zinc se vuelve más notoria. Este proceso refleja la tendencia del zinc a precipitarse como óxido en condiciones básicas a determinadas concentraciones, un comportamiento que es característico de los metales en soluciones alcalinas.

Nótese, sin embargo, la formación de iones de especies de zinc, manifestándose que el zinc es anfótero, es decir puede disolverse tanto en medios ácidos como en medios básicos, formando iones $Zn^+$ o $Zn(OH)_2^-$respectivamente.

La evolución observada, desde la presencia de iones zinc en solución hasta la formación de ZnO, recalca la importancia del pH en la química del zinc. Estos resultados no solo validan las predicciones del software HYDRA-MEDUSA, sino que también proporcionan una base empírica para comprender cómo controlar y dirigir la formación de especies deseadas en aplicaciones

industriales y de laboratorio. La capacidad de predecir y manejar estas transiciones de fase mediante la manipulación del pH es esencial para optimizar diversos procesos

## 1.4 Caracterización de precipitados de ZnO

### *Propiedades físicas (ZnO)*

El óxido de zinc (ZnO) es un sólido blanco inodoro que se presenta principalmente en forma de polvo cristalino o granular. Tiene una estructura cristalina hexagonal y es insoluble en agua, aunque es soluble en ácidos y bases fuertes debido a su naturaleza anfótera.

Su punto de fusión es elevado, alcanzando aproximadamente los 1975°C, lo que lo hace adecuado para aplicaciones que requieren estabilidad térmica. El ZnO tiene una densidad de alrededor de 5.61 g/cm³ y es un semiconductor con una amplia banda prohibida, lo que le confiere propiedades ópticas y electrónicas valiosas, siendo sensible a la luz ultravioleta. Estas características físicas hacen que el óxido de zinc sea ampliamente utilizado en la fabricación de productos como protectores solares, caucho, cosméticos, y en dispositivos electrónicos y ópticos.

### *Análisis cristalográfico (ZnO)*

El polvo de ZnO fue analizado mediante difracción de rayos X (DRX), y los patrones obtenidos, que se muestran en la *Fig. 5*. El difractograma indica que la fase cristalina mayoritaria corresponde a ZnO, lo que confirma el éxito tanto en el proceso de síntesis como de la predicción de los diagramas anteriormente analizados. Sin embargo, también se detectó hidróxido de zinc ($Zn(OH)_2$), que aparece como señales débiles en el patrón de difracción.

La formación de esta fase puede atribuirse a un cambio repentino del pH durante el proceso de enjuague, lo que habría provocado que una pequeña porción de ZnO se transformara en hidróxido de Zn. Este fenómeno es común en sistemas donde el pH no se controla de manera precisa, lo que sugiere la importancia de un monitoreo cuidadoso de las condiciones del proceso

para evitar la formación de fases indeseadas. De tal forma que la presencia de $Zn(OH)_2$, sugiere una calcinación a fin de obtener una fase monocristalina de ZnO.

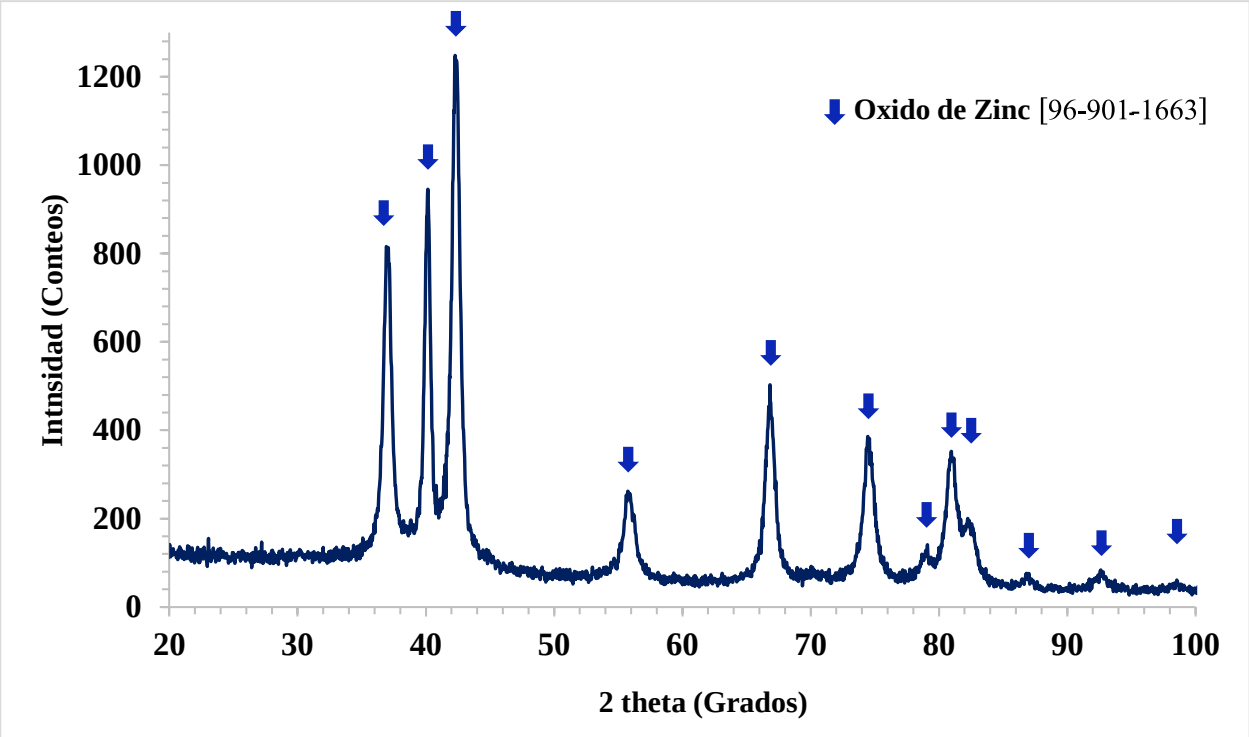



***Fig. 5 Difractograma de rayos X del precipitado obtenido en la sección 2.5 de la Metodología. Se identifican picos correspondientes a la fase cristalina de óxido de zinc (ZnO).***

## *Análisis químico mediante Espectroscopía de descomposición inducida por láser.*

El análisis químico del precipitado se realizó mediante Espectroscopia de Descomposición Inducida por Láser (LIBS), utilizando el sistema de microscopia *KEYENCE EA-300 de la serie VHX,* son presentados en la *Tabla 6.* Los resultados confirmaron que el zinc es el componente predominante, lo cual coincide con la caracterización previa realizada por difracción de rayos X (DRX), que también identificó al óxido de zinc como la fase cristalina mayoritaria. Sin embargo, en algunos sitios del análisis LIBS se detectó la presencia de hidrógeno, lo que sugiere la formación de pequeñas cantidades de hidróxido de zinc.

Esta observación refuerza la hipótesis de que el hidróxido de zinc se forma debido a fluctuaciones de pH durante el proceso, un fenómeno previamente observado en el análisis de DRX, donde

señales débiles de hidróxido de zinc fueron registradas. La correlación entre ambas técnicas confirma que, aunque el ZnO es el material principal, una pequeña fracción de $Zn(OH)_2$ también se genera, no obstante, nótese que el promedio de la tabla se del H es de 0.006, lo cual no es significativo.

***Tabla 6 Análisis químico por LIBS del precipitado obtenido de ZnO.***

| No. | Presumed material | Zn | O | H |
|---|---|---|---|---|
| 1 | Zinc compound | 66.6% | 33.4% | 0.0% |
| 2 | Zinc compound | 71.1% | 28.9% | 0.0% |
| 3 | Zinc compound | 71.2% | 28.4% | 0.4% |
| 4 | Zinc compound | 74.4% | 25.6% | 0.0% |
| 5 | Zinc compound | 68.2% | 31.1% | 0.7% |
| 6 | Zinc compound | 63.9% | 35.5% | 0.6% |
| 7 | Zinc compound | 57.0% | 43.0% | 0.0% |
| 8 | Zinc compound | 65.7% | 34.3% | 0.0% |
| 9 | Zinc compound | 55.0% | 45.0% | 0.0% |
| 10 | Zinc compound | 62.2% | 37.8% | 0.0% |
| 11 | Zinc compound | 72.8% | 27.2% | 0.0% |
| 12 | Zinc compound | 68.5% | 30.7% | 0.8% |
| 13 | Zinc compound | 68.8% | 31.2% | 0.0% |
| 14 | Zinc compound | 68.6% | 31.4% | 0.0% |
| 15 | Zinc compound | 71.3% | 28.7% | 0.0% |
| 16 | Zinc compound | **0.636** | **0.22** | **0** |
| EA-300 X300 | Zinc compound | **0.716** | **0.278** | **0.006** |

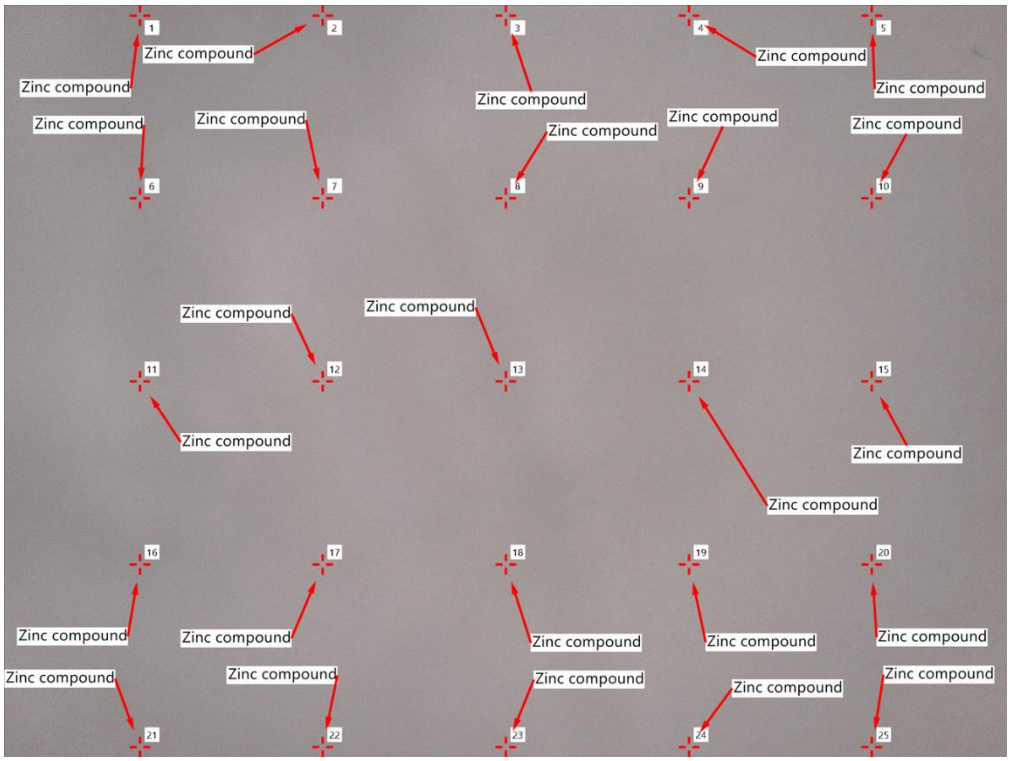



***Fig. 6 Imagen del análisis químico obtenido por LIBS indicando 25 puntos de medición del precipitado de ZnO***

# 2. CASO NITRATO DE NIQUEL II HEXAHIDRATADO $N_2NiO_6 \cdot 6\ H_2O$

## *2.1 Discusión de los diagramas de equilibrio caso nitrato de níquel II*

Para la generación de los diagramas de equilibrio del caso del nitrato de níquel II, se consideraron 1.3 gramos de nitrato de níquel II hexahidratado en 100 ml de agua destilada. Según los resultados obtenidos en la tabla 4, determinados en la *Sección 3.1 de la Metodología,* la molaridad de los iones níquel es de 0.0447 y de nitrato es de 0.0894 M en 1.3 gramos del compuesto. A continuación, se presentan los diagramas de equilibrio químico pH vs. fracción, con el objetivo de discutir los resultados obtenidos.

### *Diagrama equilibrio químico tipo logarítmico*

En el diagrama de la *Fig. 7* se muestra el logaritmo de la concentración de todas las especies en función del pH, representando las diferentes especies presentes en una solución con ion níquel $Ni^{2+}$ y nitrato $NO^{3-}$. Es importante recordar que, en el logaritmo de la concentración, representado en el eje de las ordenadas, la escala es logarítmica, en un rango de -10 a 0, donde 0 es igual a 1 Molar y -10 es igual a $1x10^{-10}$ Molar.

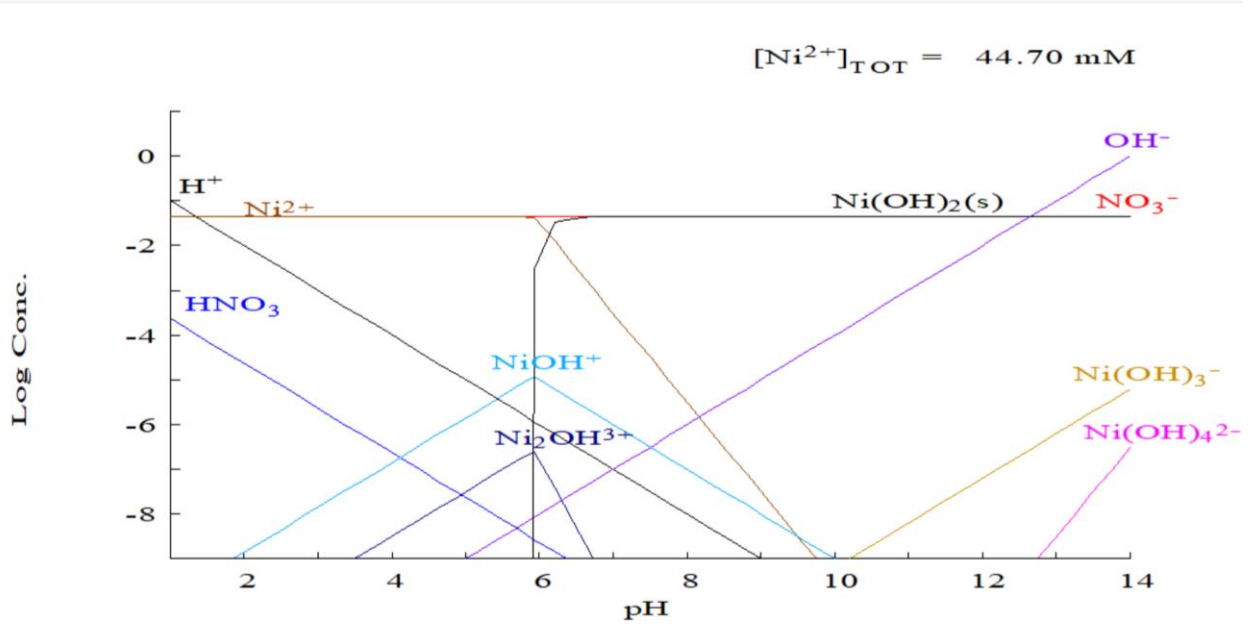



***Fig. 7 Diagrama de especiación tipo logarítmico, pH vs Fracción, del sistema $Ni^{2+}$ / $NO_3^-$, a concentraciones de 0.0447 M de $Ni^{2+}$ y 0.0894 de $NO_3^-$.***

## *Especies presentes en el diagrama tipo logarítmico del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$*

a) **$Ni^{2+}$:** Esta es la especie dominante a valores de pH ácidos, ya que en condiciones ácidas el níquel permanece en su forma iónica simple. Esto se debe a la alta disponibilidad de protones $H^+$ que previene la formación de especies hidroxiladas. En el diagrama, la curva de $Ni^{2+}$ se mantiene alta en valores de pH bajos, indicando que es la especie predominante en soluciones ácidas.

b) **$Ni(OH)^+$**: A medida que el pH aumenta, la concentración de iones $OH^-$ incrementa, favoreciendo la formación de $Ni(OH)^+$ por la reacción $Ni^{2+}+OH^- \leftrightarrow Ni(OH)_{2(s)}$.

c) **$Ni(OH)_{2(s)}$:** A pH neutros, alrededor de 6, comienza a formarse hidróxido de níquel $Ni(OH)_{2(s)}$, que es un precipitado sólido. Esta fase sólida es importante porque indica la solubilidad del níquel y su tendencia a precipitarse como $Ni(OH)_{2(s)}$ en medios más básicos. En el diagrama, $Ni(OH)_{2(s)}$ aparece como una fase sólida que limita la concentración de $Ni^{2+}$ en solución a pH altos, lo que puede observarse en una disminución en la curva de $Ni^{2+}$ cuando $Ni(OH)_{2(s)}$ comienza a formarse. El punto donde la curva de $Ni(OH)_{2(s)}$ cruza con la de $Ni^{2+}$ indica el pH donde ambas especies tienen concentraciones iguales, marcando una transición hacia la predominancia de $Ni(OH)_{2(s)}$ a pH más altos.

d) **$Ni(OH)_3^-$ y $Ni(OH)_4^{2-}$**: Por encima de pH 10, se pueden formar especies aniónicas como $Ni(OH)_3^-$ y $Ni(OH)_4^{2-}$que son complejos de níquel con múltiples grupos hidroxilo. Estas especies son estables en soluciones muy básicas, y sus curvas en el diagrama indican la formación de complejos solubles, lo que sugiere que el níquel puede seguir en solución a pesar del pH elevado, pero en una forma diferente a la de $Ni^{2+}$.

## *Interpretación del diagrama logarítmico del sistema $Zn^{2+}$ / $NO_3^-$*

La ventaja de tener todas las especies en un mismo diagrama es que permite identificar claramente los rangos de pH y las concentraciones en los cuales cada especie es predominante. En el caso del níquel, el diagrama muestra que: en soluciones muy ácidas (pH < 6), el níquel está predominantemente en su forma simple $Ni^{2+}$, lo que sugiere que, en ambientes ácidos, es más probable encontrar el níquel disuelto en forma de ion libre.

A partir de un valor de pH de 2 y hasta aproximadamente pH 10, la formación de hidroxicomplejos como $Ni(OH)^+$ comienza a ser significativa, indicando que el níquel comienza a interaccionar con $OH^-$ en la solución. Esto es clave en procesos de neutralización, donde el pH se ajusta para precipitar metales.

En un rango de pH de 6 a 14, el $Ni(OH)_{2(s)}$ precipita, reduciendo la concentración de níquel en solución, lo que es importante en aplicaciones como la remediación de aguas contaminadas o en la industria para el tratamiento de efluentes. En condiciones muy básicas (pH > 10), las especies solubles aniónicas $Ni(OH)_3^-$ y $Ni(OH)_4^{2-}$son predominantes, lo que sugiere que el níquel permanece en solución bajo estas condiciones, pero en formas complejadas con hidroxilos.

Este diagrama además de mostrar las especies predominantes a diferentes niveles de pH, también ofrece una visión clara sobre la estabilidad de las diferentes fases del níquel. Específicamente, se puede observar que no se forman nitratos de níquel en el diagrama, lo que indica que dicha fase no es estable bajo las condiciones representadas. Esto es coherente con la química de los nitratos, que suelen permanecer disociados en solución acuosa. Finalmente, la aparición de $Ni(OH)_{2(s)}$ y las especies hidroxiladas en pH más alto es un indicativo de cómo las especies de níquel pueden ser controladas en sistemas acuosos ajustando el pH.

### *Diagrama equilibrio químico tipo Fracción*

El diagrama de especies pH vs. Fracción del sistema $Ni^{2+}/NO_3^-$, generado por el software HYDRA-MEDUSA y mostrado *Fig. 8*, como se explica paso a paso en la metodología, permite visualizar la distribución de las especies presentes en solución en función del pH, proporcionando información sobre las condiciones en las que predominan ciertos iones o compuestos precipitados.

El diagrama muestra que, en un rango de pH de 0 a aproximadamente 5.6, la especie dominante es el ion níquel $Ni^{2+}$con una fracción de 1 (es decir, 100% de iones $Ni^{2+}$) esto se debe a que, en condiciones ácidas o ligeramente neutras, los iones de níquel no encuentran suficientes iones hidróxido para formar hidróxidos de níquel.

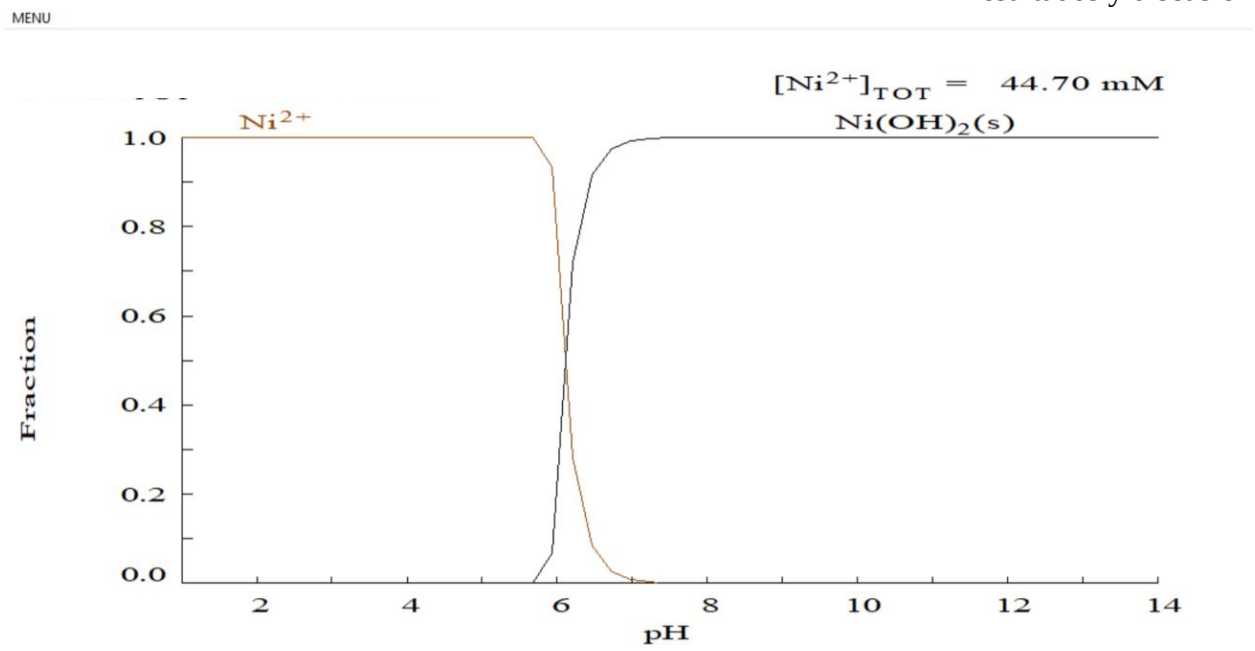



***Fig. 8 Diagrama de especiación tipo Fracción, pH vs Fracción del sistema $Ni^{2+}$ / $NO_3^-$, a concentraciones de 0.0447 M de $Ni^{2+}$ y 0.0894 de $NO_3^-$.***

La disociación del nitrato de níquel en agua se describe por la siguiente ecuación:

$$\boldsymbol{Ni(NO3)_2 \rightarrow Ni^{2+} + 2NO_3^-} \qquad \textbf{( 424 )}$$

En este intervalo de pH, la solubilidad y estabilidad de los iones metálicos se incrementan debido a la presencia de protones, lo que mantiene los aniones en forma disuelta y evita la formación de compuestos insolubles. A medida que el pH aumenta, entre 6 y 8, coexisten: el ion níquel $Ni^{2+}$, y el hidróxido de níquel $Ni(OH)_{2(s)}$ como precipitado sólido. El ion níquel $Ni^{2+}$ presente en la solución puede reaccionar con los iones hidróxido $OH^-$ según la siguiente reacción:

$$\boldsymbol{Ni_{2+} + 2OH^- \rightarrow Ni(OH)_{2(s)}} \qquad \textbf{( 45 )}$$

Esta reacción química está sustentada por Wanta y colaboradores en donde para que se lleve a cabo, se requiere un incremento de iones OH- y depende tanto de las concentraciones de los iones níquel y nitrato, como del pH de la solución (Wanta, 2020). A partir de un pH de aproximadamente 8 y hasta más de 14, se observa la formación de $Ni(OH)_{2(s)}$ como precipitado

dominante. Esto indica que, a medida que el pH aumenta hacia valores más alcalinos, la solubilidad del níquel disminuye y el compuesto $Ni(OH)_{2(s)}$ precipita y predomina.

Este análisis confirma la eficacia del software utilizado para predecir la distribución de especies en función del pH. La presencia de iones níquel en soluciones ácidas, la precipitación de hidróxido de níquel en medios neutros a ligeramente alcalinos, y la formación de complejos hidroxilados en pH altamente alcalinos son coherentes con la química bien establecida de este compuesto. Este diagrama es particularmente útil para aplicaciones industriales y de investigación.

Si se analiza el diagrama a un valor de pH=6, se observa la coexistencia de varias especies: $Ni^{+}$ y $Ni(OH)_{2(s)}$. El diagrama en este pH muestra las fracciones correspondientes a cada una, con un valor de 0.5 para $Ni(OH)_{2(s)}$, 0.95 para $Ni^{+}$, cuya suma es igual a la unidad.

## 2.2 Efecto del pH alcalino en el nitrato de níquel II en solución

El pH alcalino es importante en la transformación del nitrato de níquel II en hidróxido de níquel, y eventualmente en la formación de óxidos de níquel. Para inducir la precipitación de estos compuestos, es necesario alcalinizar la solución mediante la adición de una base, como el hidróxido de sodio (NaOH), debido a su eficacia, disponibilidad y bajo costo. No obstante, también ha sido utilizado el KOH *(Kotok, 2017).* La elección de la base no solo facilita la precipitación de los productos deseados, sino que también influye en las especies químicas presentes en la solución.

De una manera similar al ejemplo anterior, en el caso de la disolución y precipitación del nitrato de Zn, al elevar el pH de la solución, se desplaza el equilibrio químico hacia la formación y precipitación del hidróxido de níquel $Ni(OH)_{2(s)}$, que ocurre cuando el pH supera un valor crítico donde la solubilidad del níquel disminuye drásticamente. Este proceso no es simple y puede verse afectado por la disociación de NaOH, que genera iones sodio $Na^{+}$ e hidróxido $OH^{-}$. Estos iones pueden interactuar con las especies de níquel, por lo que es importante evaluar si el ion $Na^{+}$ influye en la formación de compuestos no deseados, como complejos solubles que podrían reducir la eficiencia de la precipitación del hidróxido o del óxido de níquel.

El software HYDRA-MEDUSA permite prever estas interacciones y visualizar cómo diferentes especies predominan en función del pH

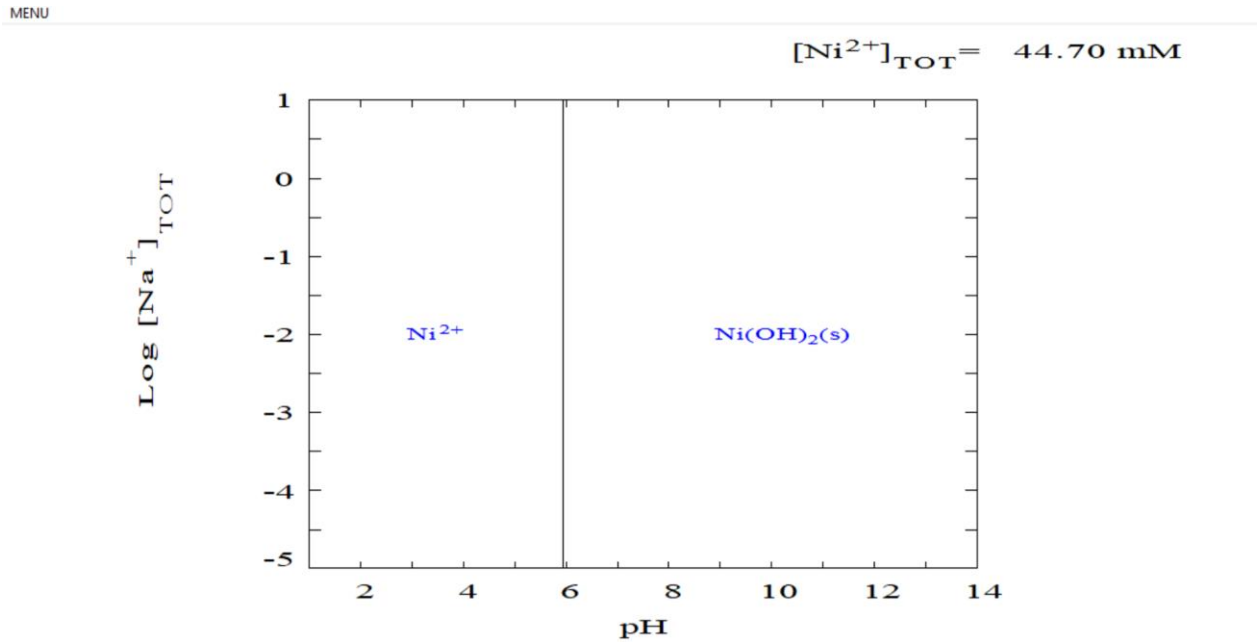



***Fig. 9 Diagrama de especiación del tipo Predominance area (Área de predominancia), pH vs Fracción, del sistema $Ni^{2+}$ / $NO_3^-$/ $Na^+$.***

El diagrama de especiación Predominace área (Área de predominancia) *pH vs. Fracción* para el sistema $Ni^{2+}$ /$NO_3^-$/$Na^+$, mostrado en la *Fig. 9*, ilustra cómo varían las especies predominantes en la solución en función del pH, con una molaridad de 0.0894 M para el nitrato, 0.0447 M para níquel y 1 M para el ion $Na^+$. Este diagrama es una herramienta ideal para comprender las condiciones bajo las cuales diferentes especies de níquel y sodio dominan la solución y para predecir cómo estas interacciones afectan el proceso de precipitación del níquel.

En un amplio rango de pH, desde valores ácidos hasta ligeramente neutros, la especie dominante es el ion $Ni^{2+}$ esto se debe a que, en condiciones ácidas, el $Ni^{2+}$ permanece libre en solución debido a la falta de suficientes iones $OH^-$ para formar compuestos precipitados, Sin embargo, a medida que el pH de la solución aumenta y se vuelve más alcalino, se observa la formación y predominancia del hidróxido de níquel $Ni(OH)_{2(s)}$, que es la forma precipitada del níquel. Este cambio ocurre porque, en condiciones alcalinas, los iones $OH^-$ reaccionan con $Ni^{2+}$, promoviendo la precipitación del hidróxido de níquel.

El hecho de que solo se presenten $Ni^{2+}$ y $Ni(OH)_{2(s)}$ en todo el rango de concentraciones de sodio indica que no se forman especies intermedias o complejos con sodio que puedan interferir en la precipitación del hidróxido de níquel. Esto simplifica el control del proceso, asegurando que, al ajustar el pH adecuadamente, se pueda obtener $Ni(OH)_{2(s)}$ puro sin la aparición de compuestos secundarios no deseados.

Este diagrama puede predecir las condiciones exactas bajo las cuales el hidróxido de níquel precipita y para garantizar que el sodio, añadido en forma de NaOH, no introduce complicaciones adicionales al sistema.

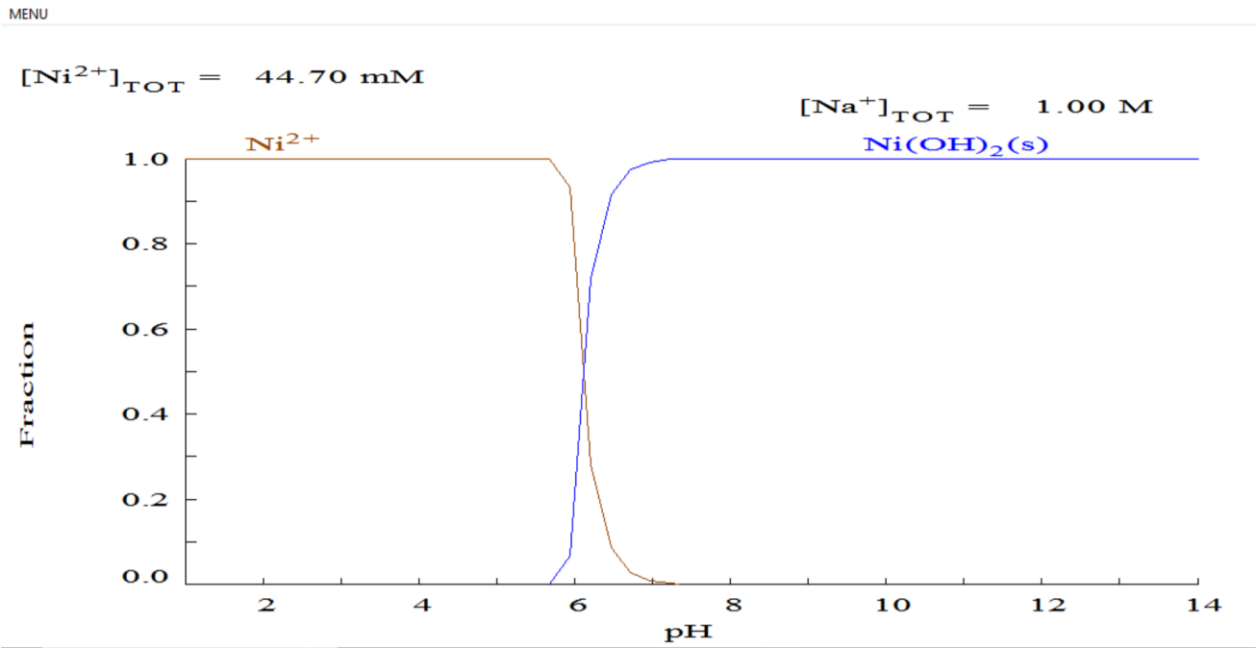



***Fig. 10 Diagrama de especiación del tipo Fracción, pH vs Fracción, del sistema $Ni^{2+}$ / $NO_3^-$/ $Na^+$, a una concentración 1M de NaOH y a concentraciones de 0.0447 M de $Ni^{2+}$ y 0.0894 de $NO_3^-$.***

El diagrama de especies pH vs. Fracción generado para el sistema $Ni^{2+}/NO_3^-/Na^+$ muestra claramente las fases y especies presentes a lo largo del rango de pH. Este diagrama muestra que la alcalinización con NaOH conduce efectivamente a la precipitación del hidróxido de níquel, sin la formación de subproductos no deseados que puedan comprometer la pureza o el rendimiento del proceso, La *Fig. 10* ilustra este diagrama, facilitando la interpretación de las condiciones bajo las cuales se forman las diferentes especies químicas en la solución.

## 2.3 Obtención de $Ni(OH)_2$ en el laboratorio

En la *Sección 3.3 de la Metodología*, se describió el procedimiento para la disolución del nitrato de níquel II hexahidratado y la adición gradual de una solución de hidróxido de sodio 1M. El uso de esta base a ha sido reportado para la síntesis de Ni(OH)2. *(Pal, 2017), (Wanta, 2020).* Este proceso es importante para observar y analizar las especies químicas presentes en diferentes condiciones de pH, de acuerdo con las predicciones realizadas mediante el software HYDRA-MEDUSA.

Al disolver 1.3 g de nitrato de níquel II hexahidratado en 100 mL de agua destilada, se obtuvo una solución verde translúcida. Esta condición indica la completa disolución de los iones $Ni^{2+}$ y $NO_3^-$ en el agua, lo cual es consistente con el comportamiento esperado en soluciones acuosas. El pH inicial de la solución, medido en 5.33, se encuentra dentro del rango donde, según el diagrama de *Fig. 10,* predominan los iones niquel disueltos. Este resultado confirma las predicciones del software, que indicaban la estabilidad de $Ni^{2+}$ en medios ácidos.

Al aumentar el pH por encima de este punto, mediante la adición de NaOH, se observa la formación de un sólido de color verde, atribuido a la especie solida de hidróxido de níquel, este fenómeno podría ocurrir porque al incrementarse la concentración de iones ($OH^-$), el equilibrio se desplaza, favoreciendo la formación de $Ni(OH)_{2(s)}$.

La evolución observada, desde la presencia de iones níquel en solución hasta la formación de $Ni(OH)_{2(S)}$, un polvo de color verde, recalca la importancia del pH en la química del níquel. Estos resultados no solo validan las predicciones del software HYDRA-MEDUSA, sino que también proporcionan una base empírica para comprender cómo controlar y dirigir la formación de especies deseadas en aplicaciones industriales y de laboratorio. La capacidad de predecir y manejar estas transiciones de fase mediante la manipulación del pH es esencial para optimizar diversos procesos.

## 2.4 Caracterización de precipitados de $Ni(OH)_2$

## *Propiedades físicas $Ni(OH)_2$*

El $Ni(OH)_2$ generalmente se presenta como un sólido de color verde o verde-azulado, La densidad de $Ni(OH)_2$ es aproximadamente 4.1 $g/cm^3$, es insoluble en agua, pero puede disolverse en ácidos minerales diluidos, formando sales de níquel.

El $Ni(OH)_2$ no tiene un punto de fusión definido, ya que se descompone térmicamente antes de fundirse, deshidratándose para formar óxido de níquel (NiO) a temperaturas superiores a 230-300 °C, también es un material antiferromagnético a temperaturas bajas, y se convierte en paramagnético cuando se calienta por encima de su temperatura de transición magnética.

el $Ni(OH)_2$ es un mal conductor eléctrico, pero su conductividad puede mejorar en soluciones alcalinas cuando se encuentra en la forma de NiO(OH) como parte de celdas de batería, por consecuencia se comporta como un semiconductor *(Ash, 2020).*

## *Análisis cristalográfico $Ni(OH)_2$*

Los patrones de difracción se muestran en la ***Error! Reference source not found.*** del polvo de hidróxido de níquel ($Ni(OH)_2$), el difractograma reveló que esta fase es la cristalina mayoritaria, lo que valida la eficacia del proceso de síntesis y confirma las predicciones basadas en los diagramas de equilibrio químico previamente analizados.

La predominancia de $Ni(OH)_2$ sugiere que las condiciones de pH y la concentración de reactivos durante la síntesis fueron adecuadas para favorecer su formación.

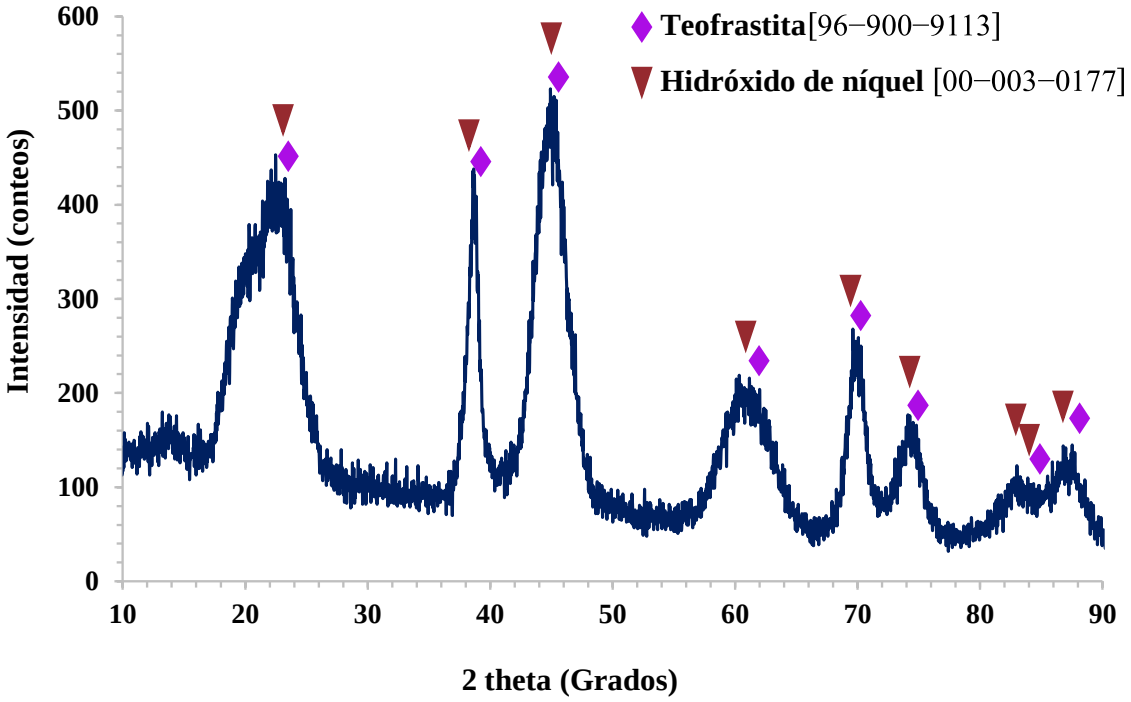



***Fig. 11 Difractograma de rayos X del precipitado obtenido en la sección 3.3 de la Metodología. Se identifican picos correspondientes a las fases de teofrastita ($H_2NiO_2$) e hidróxido de níquel ($Ni(OH)_2$).***

## *Espectroscopia de descomposición inducida por láser $Ni(OH)_2$*

El análisis químico del precipitado se realizó mediante Espectroscopia de Descomposición Inducida por Láser (LIBS), utilizando el sistema KEYENCE EA-300 de la serie VHX. Los resultados confirmaron que el hidróxido de níquel es el componente predominante, lo cual coincide con la caracterización previa realizada por difracción de rayos X (DRX), que identificó al $Ni(OH)_2$ como la fase cristalina mayoritaria, así como la teofrastita, una variante del hidróxido de níquel.

Este hecho confirma que dicha fase se genera debido a fluctuaciones de pH durante el proceso de síntesis, fenómeno corroborado previamente por DRX. La correlación entre ambas técnicas confirma que el $Ni(OH)_2$ es la fase principal.

***Tabla 7 Análisis químico obtenido por LIBS del precipitado obtenido (Ni(OH)2)***

| No. | Presumed material | O | Ni | H |
|---|---|---|---|---|
| 1 | Nickel compound | 58.0% | 21.5% | 20.5% |
| 2 | Nickel compound | 61.6% | 19.4% | 19.0% |
| 3 | Nickel compound | 64.2% | 19.1% | 16.7% |
| 4 | Nickel compound | 58.1% | 22.1% | 19.8% |
| 5 | Nickel compound | 64.7% | 18.9% | 16.4% |
| 6 | Oxygen compound | 70.1% | 13.1% | 16.8% |
| 7 | Oxygen compound | 67.7% | 14.3% | 18.0% |
| 8 | Nickel compound | 60.7% | 23.4% | 15.9% |
| 9 | Oxygen compound | 67.7% | 15.1% | 17.2% |

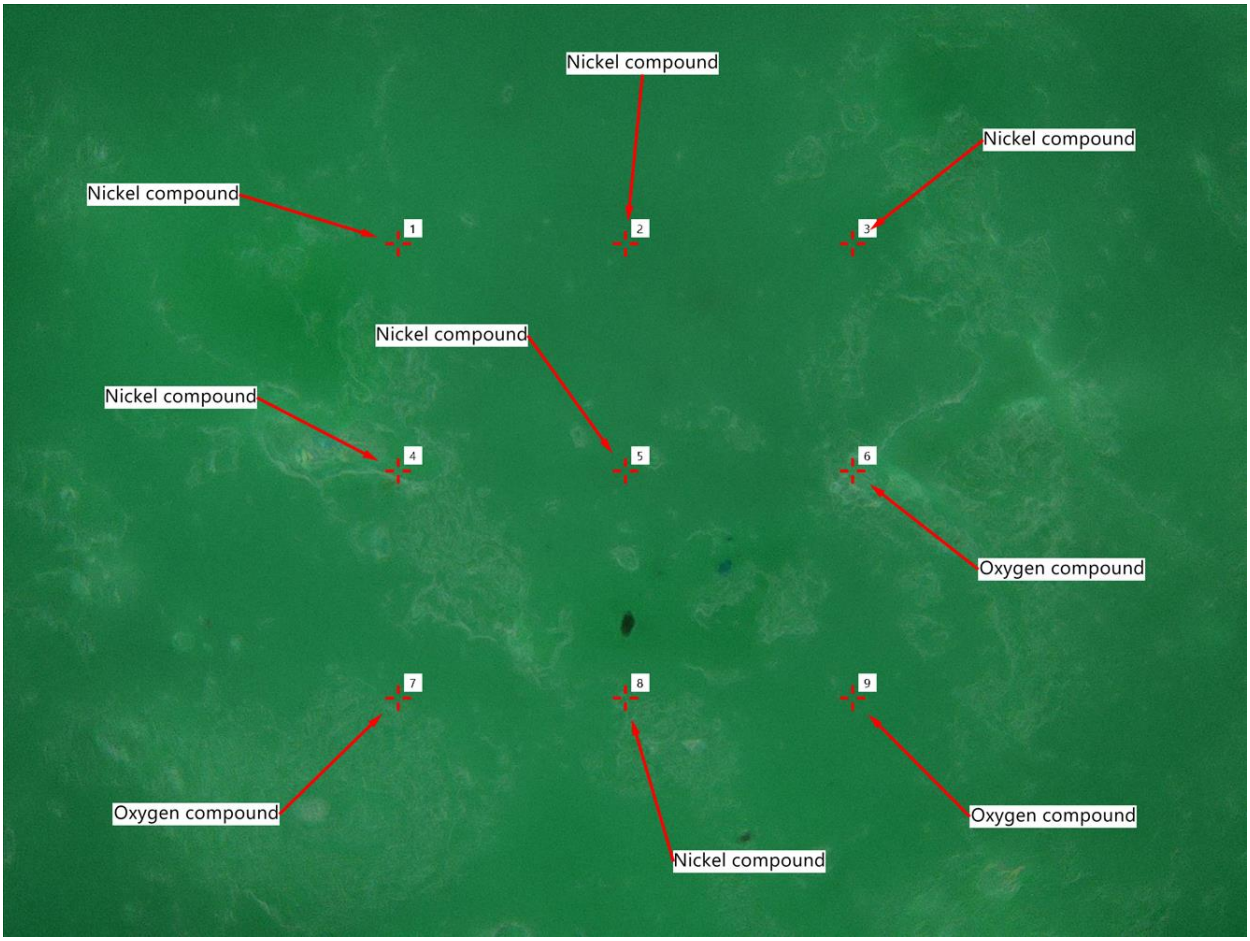



***Fig. 12 Imagen del análisis químico obtenido por LIBS indicando nueve puntos de medición del precipitado ($Ni(OH)_2$).***

# 3. CASO NITRATO DE ALUMINIO NONAHIDRATADO $Al(NO_3)_3 \cdot 9\ H_2O$

## 3.1 Discusión de los diagramas de equilibrio caso nitrato de aluminio

Para la generación de los diagramas de equilibrio del caso del nitrato de aluminio, se consideraron *2.5* gramos de nitrato de *aluminio nonahidratado*. Según los resultados obtenidos en la *tabla 5,* determinados en la *Sección 4.1 de la Metodología*, la molaridad de los iones aluminio y nitrato es de 0.0*666* M y 0.1998 M respectivamente en *2.5* gramos del compuesto. A continuación, se presentan los diagramas de equilibrio químico pH vs. *F*racción *de especies*, con el objetivo de discutir los resultados obtenidos.

### *Diagrama equilibrio químico tipo logarítmico*

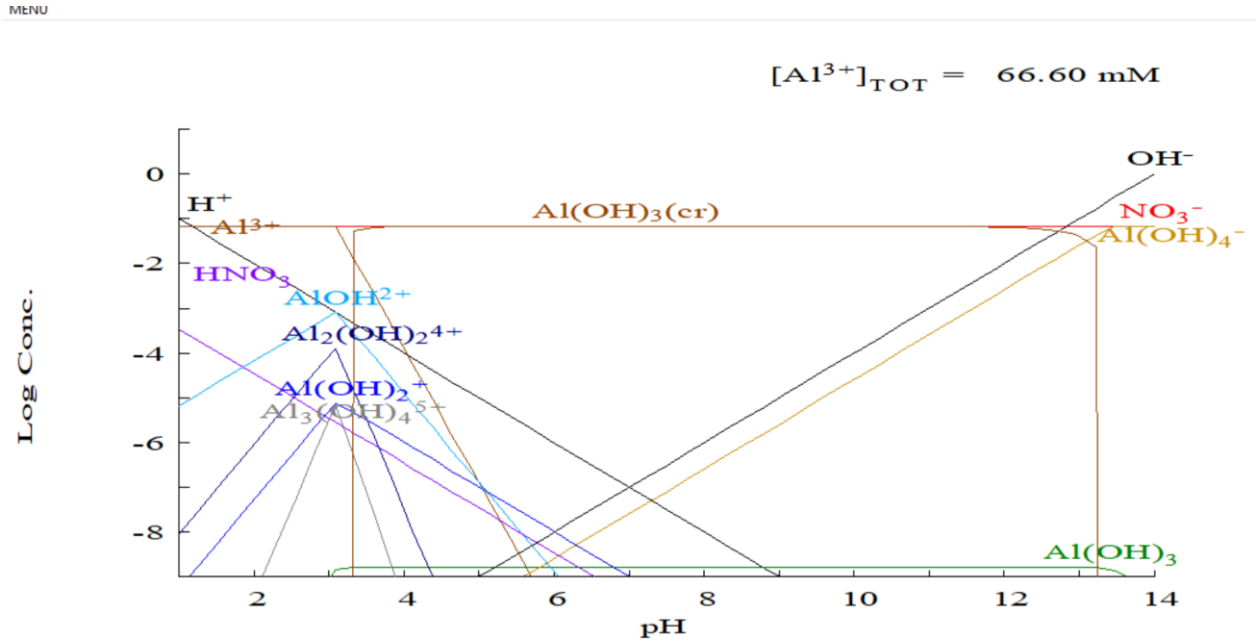



***Fig. 13 Diagrama de especiación tipo logarítmico, pH vs Fracción, del sistema $Al^{3+}$/ $NO_3^-$, a concentraciones de 0.0666 M de $Al^{3+}$ y 0.1998 de $NO_3^-$.***

En el diagrama de la *Fig. 13* se muestra el logaritmo de la concentración de todas las especies en función del pH, representando las diferentes especies presentes en una solución de nitrato de aluminio. Es importante señalar que el logaritmo de la concentración representado en el eje de las ordenadas está en escala logarítmica, abarcando un rango de -10 a 0, donde 0 es igual a 1 Molar y -10 equivale a $1x10^{-10}$ Molar.

## *Especies presentes en el diagrama logarítmico del sistema $Al^{3+}/NO_3^-$*

a) **$Al^{3+}$:** A valores de pH ácidos, el ion aluminio $Al^{3+}$ es la especie predominante en solución. Esto se debe a que, en condiciones ácidas, el aluminio permanece en su forma iónica simple debido a la abundancia de protones $H^+$, que impiden la formación de especies hidroxiladas. En el diagrama, la curva de $Al^{3+}$ es dominante en la región ácida, lo que refleja la estabilidad del aluminio en su forma iónica en este rango de pH.

b) **$Al(OH)^{2+}$:** A medida que el pH aumenta, los iones hidróxidos $OH^-$ comienzan a reaccionar con $Al^{3+}$ para formar el complejo $Al(OH)^{2+}$. Esta especie domina en el diagrama en un pH cercano a 3. El cruce entre las curvas de $Al^{3+}$ y $Al(OH)^{2+}$ indica el pH en el que ambas especies tienen concentraciones iguales.

c) **$Al(OH)_3$:** En un rango de pH cercano a 3, se forma $Al(OH)_3$, un precipitado sólido. Este precipitado limita la solubilidad del aluminio, indicando que, en condiciones moderadamente básicas, el aluminio tiende a precipitar en forma de hidróxido de aluminio. La curva correspondiente a $Al(OH)_3$ en el diagrama muestra la reducción de la concentración de aluminio libre en solución a medida que se precipita.

d) **$Al(OH)_4^-$:** A pH más altos, la especie aniónica $Al(OH)_4^-$ comienza a predominar. Esta especie se forma cuando el aluminio reacciona con un exceso de iones hidróxidos, manteniéndose en solución en forma de un complejo soluble. En el diagrama, esta especie aparece en mayor predominancia en el extremo básico, reflejando la estabilidad de los complejos hidroxilados del aluminio bajo condiciones fuertemente alcalinas.

## *Interpretación del diagrama logarítmico del sistema $Al^{3+}/NO_3^-$*

La representación de todas las especies en un único diagrama permite identificar claramente los rangos de pH en los que cada una es predominante. En el caso del aluminio:

El comportamiento del aluminio en solución acuosa depende fuertemente del pH, con distintas especies predominando en diferentes rangos de pH. A valores de pH ácidos (condiciones muy ácidas), el aluminio permanece principalmente como ion simple $Al^{3+}$. A medida que el pH aumenta, se observa la formación de complejos hidroxilados como $Al(OH)^{2+}$, seguido por la

precipitación de $Al(OH)_3$ y la formación de especies más complejas como $Al(OH)_4^-$ en condiciones alcalinas.

A un pH cercano a 3, comienza la precipitación de $Al(OH)_3$, lo que indica una disminución en la solubilidad del aluminio a medida que el pH se vuelve más básico. Esto refleja una transición en la química del aluminio desde una fase predominantemente soluble a una en la que el aluminio tiende a precipitar.

En condiciones más básicas (pH más alto), el aluminio tiende a formar complejos solubles como $Al(OH)_4^-$, lo que muestra que, bajo estas condiciones, la forma hidroxilada del aluminio es más estable. Las distintas especies de aluminio se forman debido a las interacciones con iones hidróxido en solución, lo que indica una fuerte dependencia de la concentración de $OH^-$ y del pH. Cada especie tiene un rango de pH en el que es más estable, lo que apunta que, para controlar la química del aluminio en un sistema, es esencial ajustar cuidadosamente el pH para promover la formación de la especie deseada.

El diagrama no solo muestra las especies predominantes a diferentes niveles de pH, sino que también proporciona información sobre la estabilidad de diferentes fases del aluminio. Específicamente, no se observan nitratos de aluminio en el diagrama, demostrando que esa fase no es estable bajo las condiciones representadas, por lo tanto, es ideal emplearlo en la formación de $Al(OH)_3$. Esto concuerda con la naturaleza de los nitratos, que suelen estar completamente disociados en solución acuosa.

El uso de una escala logarítmica en el diagrama permite una visualización más clara de las concentraciones de las diferentes especies en función del pH, abarcando un rango amplio de concentraciones (desde 1 M hasta $1x10^{-10}$ M). Esto es importante para entender la predominancia relativa de cada especie en función del pH y cómo pequeñas variaciones en pH pueden resultar en cambios significativos en la forma en que el aluminio se comporta en solución.

## Diagrama equilibrio químico tipo Fracción

El diagrama de especies pH vs. Fracción del sistema $Al^{3+}$/ $NO^{3-}$, generado por el software HYDRA-MEDUSA y mostrado *Fig. 14*, permite visualizar la distribución de las especies presentes en

solución en función del pH, proporcionando las condiciones en las que predominan ciertos iones o compuestos precipitados.

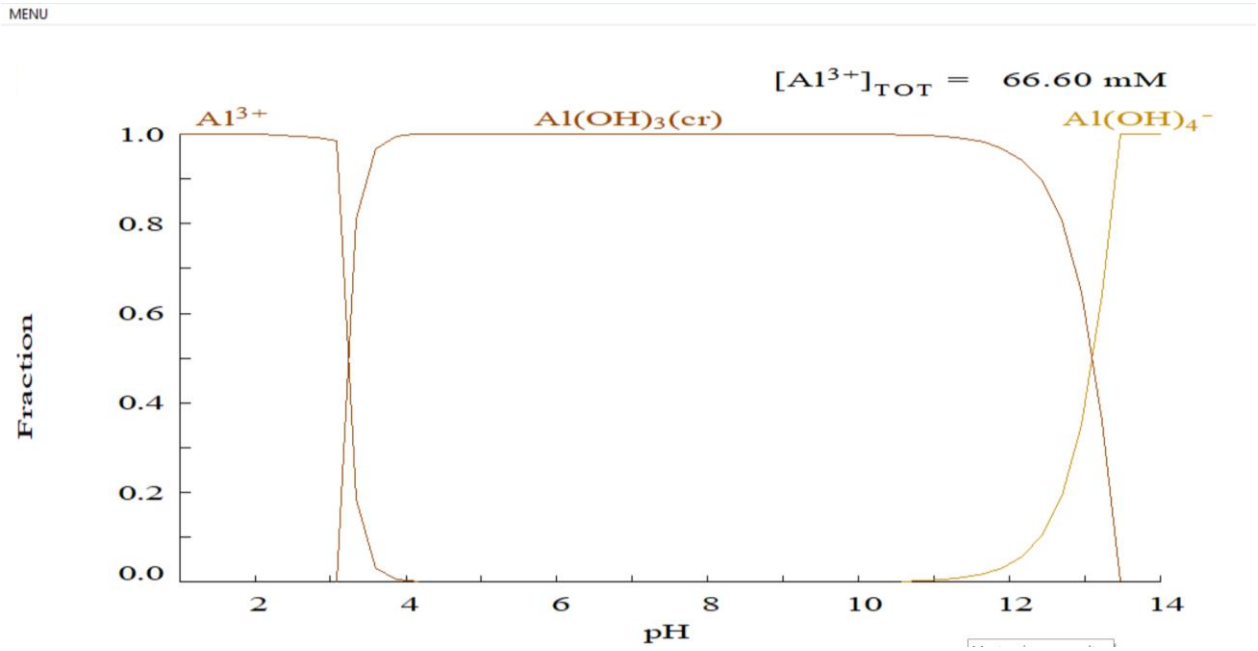



***Fig. 14 Diagrama de especiación tipo Fracción, pH vs Fracción, del sistema $Al^{3+}$/ $NO_3^-$, a concentraciones 0.0666 M de $Al^{3+}$ y 0.1998 M de $NO_3^-$.***

El diagrama muestra que, en un rango de pH de 0 a aproximadamente 3, la especie dominante es el ion aluminio $Al^{3+}$, con una fracción de 1 (es decir, 100% de $Al^{3+}$). Esto se debe a que, en condiciones muy ácidas, los iones de aluminio permanecen en su forma libre debido a la alta concentración de protones $H^+$, lo que evita la formación de complejos hidroxilados. La disociación del nitrato de aluminio en agua se describe por la siguiente ecuación:

$$\boldsymbol{Al(NO_3)_3 \rightarrow Al^{3+} + 3NO_3^-} \qquad \textbf{( 46 )}$$

A partir de un pH de aproximadamente 3 y hasta alrededor de 12, se observa la formación de $Al(OH)_{3(cr)}$, un hidróxido de aluminio que precipita y domina en esta región de pH. Esta precipitación reduce drásticamente la cantidad de aluminio libre en solución, indicando que, en condiciones neutras y básicas, el aluminio se precipita de manera efectiva como hidróxido. Sin embargo, se ha encontrado que el pH de precipitación con nitrato de amonio, tiene un efecto significativo en la estructura cristalina del material obtenido; en este sentido Du y colaboradores

encontraron que entre un pH de 5 a 7 se obtiene principalmente la fase bohemita no obstante en un pH 8 hasta 11 la bayerita es la fase principal mayoritaria *(Du, 2009).* Por otro lado, la precipitación con hidróxido de sodio de nitrato de aluminio hidratado en solución, indica que un pH de 5 se obtiene principalmente la fase cristalina gibbsita *(Dembowski, 2020).*

A pH superiores a 10.5, el diagrama muestra la aparición de especies solubles como $Al(OH)_4^-$ un complejo aniónico que se vuelve predominante en condiciones fuertemente alcalinas. Este complejo se forma cuando el aluminio se coordina con un exceso de iones hidróxido, aumentando su solubilidad en medios básicos.

$$\boldsymbol{Al(OH)_{3(cr)} + OH^- \rightarrow Al(OH)_4^-} \qquad \textbf{( 47 )}$$

Estos datos confirman la eficacia del software utilizado para predecir la distribución de especies en función del pH. La presencia de iones aluminio en soluciones ácidas, la precipitación de hidróxido de aluminio en medios neutros y alcalinos, y la formación de complejos aniónicos en pH altamente alcalinos *(Ibarra-Cruz, 2024).*

## 3.2 Efecto del pH alcalino en el nitrato de aluminio en solución

El pH alcalino es fundamental en la transformación del nitrato de aluminio nonahidratado en hidróxido de aluminio. Para inducir la precipitación de estos compuestos, es necesario elevar el pH de la solución mediante la adición de una base, como el hidróxido de sodio (NaOH), debido a su eficacia, disponibilidad y bajo costo. La elección de la base no solo facilita la precipitación del hidróxido de aluminio, sino que también influye en las especies químicas presentes en la solución.

Al aumentar el pH, el equilibrio químico se desplaza hacia la formación y precipitación del hidróxido de aluminio $Al(OH)_{3(cr)}$, que ocurre cuando el pH supera un valor crítico donde la solubilidad del aluminio disminuye significativamente. Sin embargo, este proceso puede complicarse debido a la disociación de NaOH, que genera iones sodio $Na^+$ e hidróxido $OH^-$. Estos iones pueden interactuar con las especies de aluminio, y es esencial evaluar si el ion $Na^+$ puede influir en la formación de complejos solubles indeseados, que podrían afectar la eficiencia de la precipitación del hidróxido de aluminio.

El software HYDRA-MEDUSA permite anticipar estas interacciones y visualizar cómo diferentes especies predominan en función del pH. El diagrama de especies pH vs. Fracción generado para el sistema $Al^{3+}/NO_3^-/Na^+$ de la *Fig. 16*, muestra las fases y especies presentes a lo largo del rango de pH. Por ejemplo, a un pH alrededor de 3, se observa la precipitación de $Al(OH)_{3(cr)}$, mientras que en condiciones más alcalinas (pH > 10), se pueden formar complejos solubles como $Al(OH)_4^-$ lo cual aumenta la solubilidad del aluminio en medios muy alcalinos.

Este análisis pierde asegurar que la alcalinización con NaOH conduce eficazmente a la precipitación del hidróxido de aluminio, sin la formación de subproductos no deseados que puedan comprometer la pureza o el rendimiento del proceso. Este reactivo es ampliamente utilizado en procesos de precipitación de hidróxidos de aluminio, aunque también se han usado KOH e hidróxido de amonio, o carbonatos *(Ziva, 2021) (Ibarra-Cruz, 2024) (Dembowski, 2020).*

Este enfoque tiene gran relevancia en aplicaciones industriales, donde es vital controlar el pH para asegurar que la precipitación del hidróxido de aluminio ocurra bajo condiciones óptimas, maximizando la eficiencia y pureza del producto final.

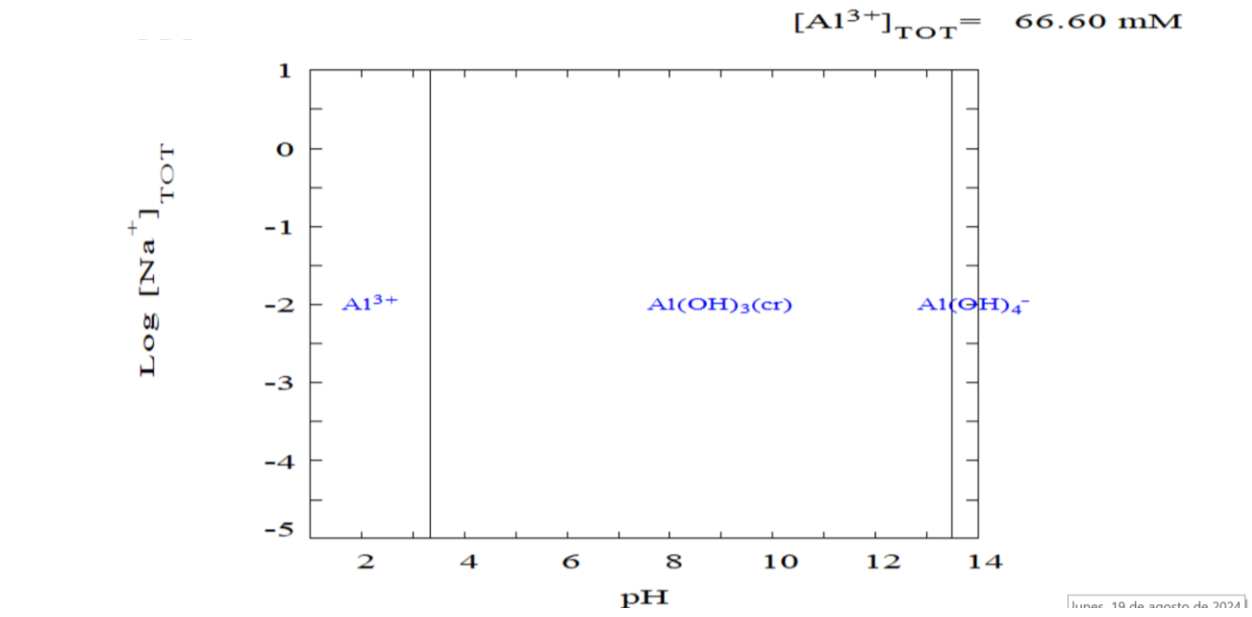



***Fig. 15 Diagrama de especiación del tipo predominance area, pH vs el Log de la concentración, del sistema $Al^{3+}/NO_3^-/Na^+$.***

El diagrama de especiación "Área de predominancia" pH vs. El Log de la concentración para el sistema $Al^{3+}$ /$NO_3^-$ /$Na^+$, con una molaridad de 0.0666 M para el aluminio, 0.1998 para el nitrato

y 1 M para el sodio, ilustrado en la *Fig. 15,* es una herramienta clave para comprender cómo varían las especies de aluminio en solución en función del pH. Este diagrama permite predecir las condiciones bajo las cuales diferentes especies de aluminio predominan en la solución y cómo estas interacciones afectan el proceso de precipitación del hidróxido de aluminio.

En un rango de pH ácido, la especie dominante es el ion $Al^{3+}$. Esto se debe a que, en estas condiciones, el $Al^{3+}$ permanece en solución sin precipitar, debido a la escasez de iones $OH^-$ suficientes para formar el hidróxido de aluminio $Al(OH)_{3(cr)}$. A medida que el pH de la solución aumenta y se vuelve más alcalino, comienza a formarse $Al(OH)_{3(cr)}$, que es la forma precipitada del aluminio, y esta especie pasa a ser la predominante en la solución este cambio se produce porque los iones $OH^-$ reaccionan con $Al^{3+}$, promoviendo la precipitación del hidróxido de aluminio.

A pH más elevados, superiores a 13.5, se observa la formación de especies complejas solubles como $Al(OH)_4^-$, lo que indica que en condiciones altamente alcalinas, el aluminio puede volver a disolverse en forma de complejos hidroxilados. Este comportamiento es importante, ya que puede afectar la eficiencia de la precipitación del $Al(OH)_{3(cr)}$ si no se controla adecuadamente el pH.

El diagrama muestra que, en todo el rango de concentraciones de sodio, solo se presentan $Al(OH)_{3(s)}$ y $Al(OH)_4^-$. No se forman especies intermedias o complejos con sodio que pudieran interferir en la precipitación del hidróxido de aluminio.

Como en el caso de Zn, el aluminio también es anfótero, es decir puede disolverse tanto en medios ácidos como en medios básicos, formando iones $Zn^+$ o $Zn(OH)_2^-$respectivamente.

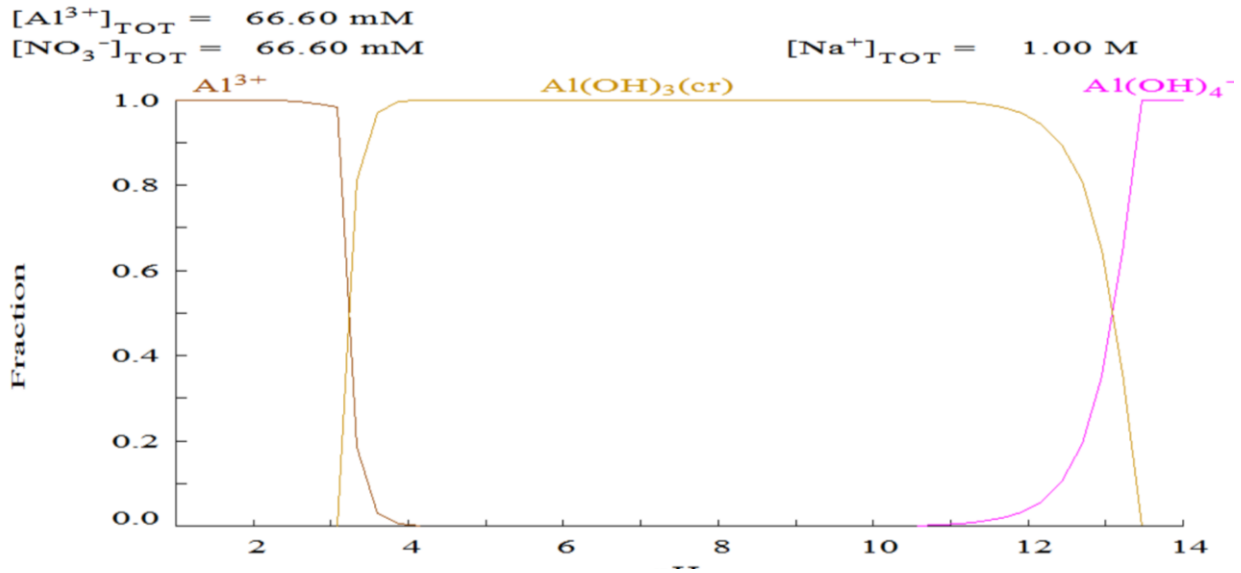



***Fig. 16 Diagrama de especiación del tipo Fracción, pH vs Fracción del sistema $Al^{3+}/NO_3^-/Na^+$, a una concentración 1M de NaOH y a concentraciones de 0.0666 M de $Al^{3+}$y 0.1998 M de $NO_3^-$.***

## 3.3 Obtención de $Al(OH)_3$ en el laboratorio

En la Sección *4.3 de la Metodología*, se describió el procedimiento para la preparación de una solución de nitrato de aluminio nonahidratado y la posterior adición gradual de una solución de hidróxido de sodio 1 M. En este proceso se pudo observar y analizar las especies químicas presentes en diversas condiciones de pH, conforme a las predicciones realizadas con el software HYDRA-MEDUSA.

Al disolver 2.5 g de nitrato de aluminio nonahidratado en 100 mL de agua destilada, se obtuvo una solución acuosa clara. Esta transparencia indica la completa disolución de los iones $Al^{3+}$ y $NO_3^-$ en el agua, lo cual es consistente con el comportamiento esperado en soluciones acuosas. El pH inicial de la solución, medido en 2.91, se encuentra dentro del rango donde predominan los iones de aluminio disueltos, según el diagrama de especies.

Al aumentar el pH mediante la adición gradual de NaOH 1 M, se comenzó a observar la formación de hidróxido de aluminio, $Al(OH)_3$. Esto se debe a que, al incrementarse la concentración de iones $OH^-$, el equilibrio se desplaza, favoreciendo la precipitación del hidróxido. Este cambio es visible en el diagrama de especies de la *Fig. 16*, donde la aparición de $Al(OH)_3$ se vuelve notable conforme el pH alcanza valores cercanos a la neutralidad. Se registró un pH final de 7.12, lo que confirma la neutralización de la solución y la formación del precipitado esperado.

La transición observada desde la presencia de iones $Al^{3+}$ disueltos hasta la formación de $Al(OH)_3$ recalca la importancia del pH en la química del aluminio. Estos resultados validan las predicciones del software HYDRA-MEDUSA y proporcionan una base empírica para comprender cómo controlar la precipitación de especies deseadas en aplicaciones industriales y de laboratorio.

## 3.4 Caracterización de precipitados de $Al(OH)_3$

### *Propiedades físicas $Al(OH)_3$*

El hidróxido de aluminio, $Al(OH)_3$, es un compuesto sólido de color blanco que puede presentarse en forma amorfa o cristalina. Es insoluble en agua, pero su carácter anfótero le permite reaccionar tanto con ácidos como con bases, lo que lo convierte en una sustancia versátil en diversas aplicaciones químicas.

El hidróxido de aluminio se descompone a temperaturas superiores a 400°C, liberando vapor de agua y transformándose en óxido de aluminio ($Al_2O_3$). El Al tiene una densidad aproximada de 2.42 g/cm³ y es inodoro. En condiciones acuosas, puede formar $Al(OH)_3$ una especie gelatinosa cuando está hidratado.

### *Análisis cristalográfico $Al(OH)_3$*

El análisis cristalográfico mediante difracción de rayos X (DRX) del polvo de hidróxido de aluminio, presentado en la *Fig. 17*, revela la presencia de tres fases cristalinas distintas: bayerita, doyleita y gibbsita. Estos resultados son coherentes con la capacidad del $Al(OH)_3$ para exhibir diversas formas cristalinas. La identificación de estas fases confirma la eficacia del proceso de síntesis y valida las predicciones basadas en los diagramas de equilibrio químico previamente analizados. Este hallazgo no solo respalda la precisión del método sintético empleado, sino que también resalta la importancia de comprender la formación de diferentes fases cristalinas, lo que puede ser crucial para diversas aplicaciones futuras del hidróxido de aluminio.

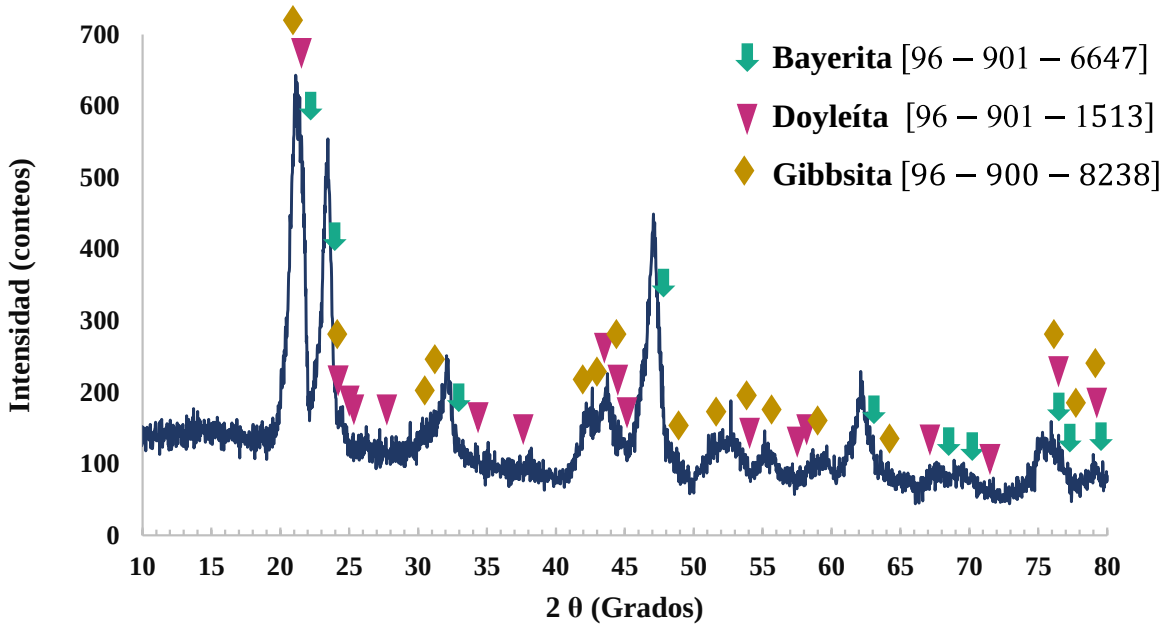



***Fig. 17 Difractograma de rayos X del precipitado obtenido en la sección 4.3 de la Metodología. Se identifican picos correspondientes a las fases de Bayerita, Doyleíta y Gibbsita.***

## *Espectroscopía de descomposición inducida por láser $Al(OH)_3$*

El análisis químico fue realizado utilizando la técnica de Espectroscopia de Descomposición Inducida por Láser (LIBS) con el sistema KEYENCE EA-300 de la serie VHX.

El análisis revela la presencia de hidróxido de aluminio, así como de oxígeno y agua. Estos resultados sugieren que la técnica LIBS se centra principalmente en la caracterización de la superficie de la muestra. Dado que la muestra analizada era un polvo muy fino e hidratado, es probable que haya absorbido humedad del entorno. Esta absorción de agua ambiental se refleja en los resultados del análisis. La presencia de agua en el polvo puede deberse a su alta superficie específica y a su capacidad para captar humedad del ambiente, lo que destaca la importancia de considerar las condiciones de almacenamiento y manejo de la muestra para obtener resultados precisos.

***Tabla 8 Análisis químico obtenido por LIBS del precipitado obtenido $Al(OH)_3$.***

| No. | Presumed material | O | Al | H |
|---|---|---|---|---|
| 1 | Aluminum oxide | 59.4% | 30.1% | 10.5% |
| 2 | Oxygen compound | 79.5% | 11.5% | 9.0% |
| 3 | Water | 86.4% | 0.0% | 13.6% |
| 4 | Water | 85.5% | 0.0% | 14.5% |
| 5 | Aluminum oxide | 68.5% | 21.6% | 9.9% |
| 6 | Aluminum oxide | 67.0% | 23.6% | 9.4% |
| 7 | Oxygen | 100.0% | 0.0% | |
| 8 | Aluminum oxide | 66.8% | 22.0% | 11.2% |
| 9 | Aluminum oxide | 70.6% | 19.8% | 9.6% |

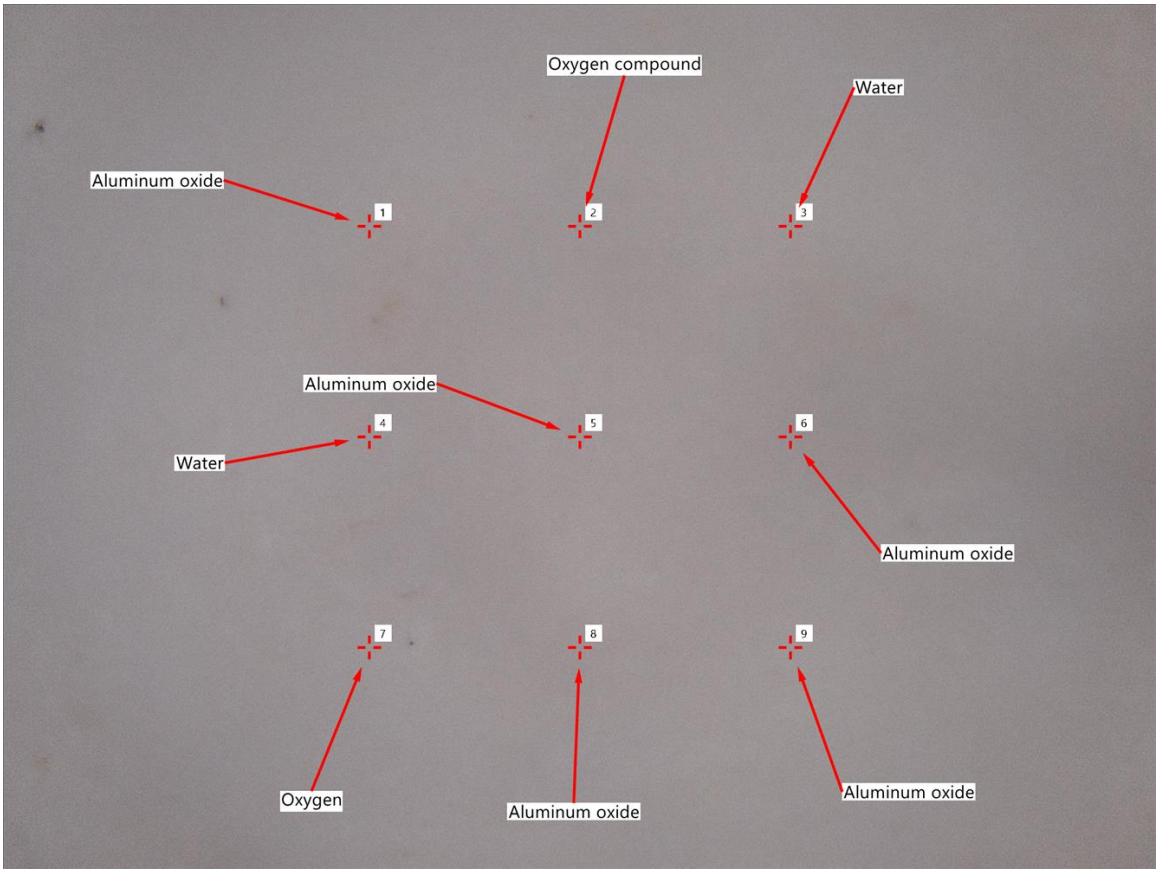



***Fig. 18 Imagen del análisis químico obtenido por LIBS indicando nueve puntos de medición del precipitado de $Al(OH)_3$.***

Estos resultados obtenidos proporcionan una comprensión detallada de la estructura y composición de ZnO, $Ni(OH)_2$ y $Al(OH)_3$. El uso de los diagramas HYDRA-MEDUSA ha sido esencial para predecir y validar las fases cristalinas observadas, y para interpretar la influencia de las condiciones experimentales en los resultados. La integración de estas técnicas analíticas y el análisis de los diagramas han permitido una evaluación completa y precisa de los compuestos estudiados.

# Conclusiones

# 1. CONCLUSIONES

En este trabajo, se construyeron diagramas de equilibrio químico mediante la predicción con el software HYDRA-MEDUSA en una solución alcalina adicionada con NaOH y utilizando nitratos de Zn, NI y Al. Se analizó la obtención de sólidos precipitados de $ZnO_{(cr)}$, $Ni(OH)_{2(s)}$ y $Al(OH)_{3(cr)}$, validándose los resultados exitosamente mediante experimentación.

Los diagramas generados con el software HYDRA-MEDUSA predijeron que a valores de pH que oscilan entre 6.5 y 13, se formaría óxido de zinc $ZnO_{(cr)}$ como la fase más estable de un precipitado sólido de color blanco.

Esta predicción fue confirmada experimentalmente al registrarse un pH final de 11.95 tras la adición de hidróxido de sodio y a través de la caracterización del polvo blanco obtenido, utilizando difracción de rayos X (DRX) y análisis químico. Se verificó la formación de $ZnO_{(cr)}$, en concordancia con las predicciones teóricas, aunque se detectaron mínimas fases cristalinas secundarias de hidróxido de zinc, posiblemente debido a la reacción superficial del polvo con la humedad presente en la atmósfera.

En cuanto a la síntesis del hidróxido de níquel, los diagramas indicaron la formación de $Ni(OH)_{2(S)}$ a valores de pH entre 7.5 y 14.

Experimentalmente, se corroboró la precipitación de este compuesto de color verde a un valor de pH de 8.11. Posteriormente el polvo se caracterizó mediante DRX y análisis químico por LIBS, corroborando la formación de $Ni(OH)_{2(S)}$. En ambos análisis se encontraron otras fases cristalinas, como la teofrastita, un compuesto cristalino inestable.

El estudio de la precipitación de $Al(OH)_{3(cr)}$ estudiados teóricamente con los diagramas de HYDRA-MEDUSA, indicaron que esta reacción ocurre en un rango de pH entre 3 y 12.

Experimentalmente, se ajustó el pH a 7.12, obteniendo un precipitado blanco tipo gel. Las formaciones del polvo de hidróxidos de aluminio se confirmaron mediante DRX y LIBS, verificando la presencia del compuesto.

El uso de hidróxido de sodio (NaOH) como alcalinizante de la solución resultó adecuado, ya que el ion sodio no reaccionó con los productos que se pretendían obtener, tal como se predijo en los diagramas construidos.

La validación experimental de los diagramas de equilibrio ha demostrado su eficacia como herramientas computacionales para la predicción y caracterización de especies químicas en diversas condiciones, proporcionando una base sólida para investigaciones educativas, industriales y científicas y facilitando el desarrollo de aplicaciones al optimizar procesos y mejorar la eficiencia en el uso de materiales y reactivos.

Estos resultados resaltan la importancia de los diagramas de equilibrio en la química aplicada, no solo como herramientas predictivas y analíticas, sino también como valiosas guías educativas para estudiantes de química inorgánica, ciencia de materiales, geología ambiental y metalurgia extractiva, de maestría, doctorado y posdoctorado.

# Referencias

# 1. BIBLIOGRAFÍA


Abdulrahman, A. F., Ahmed, S. M., Hamad, S. M., Almessiere, M. A., Ahmed, N. M., & Sajadi, S. M. (2021). Effect of different pH values on growth solutions for the ZnO nanostructures. Chinese Journal of Physics, 71, 175-189.

Ash, B., Nalajala, V. S., Popuri, A. K., Subbaiah, T., & Minakshi, M. (2020). Perspectives on nickel hydroxide electrodes suitable for rechargeable batteries: Electrolytic vs. chemical synthesis routes. Nanomaterials, 10(9), 1878.

Atkins, P., & De Paula, J. (2013). Elements of physical chemistry. Oxford University Press, USA.

Chang, R. (2010). Química, 10ma edición McGraw-Hill–Mexico.

Chen, C., Liu, P., & Lu, C. (2008). Synthesis and characterization of nano-sized ZnO powders by direct precipitation method. Chemical Engineering Journal, 144(3), 509-513.

Dembowski, M., Snyder, M. M., Delegard, C. H., Reynolds, J. G., Graham, T. R., Wang, H. W., ... & Pearce, C. I. (2020). Ion–ion interactions enhance aluminum solubility in alkaline suspensions of nano-gibbsite (α-Al (OH) 3) with sodium nitrite/nitrate. Physical Chemistry Chemical Physics, 22(8), 4368-4378.

Du, X., Wang, Y., Su, X., & Li, J. (2009). Influences of pH value on the microstructure and phase transformation of aluminum hydroxide. Powder Technology, 192(1), 40-46.

Ghorbani, H. R., Mehr, F. P., Pazoki, H., & Rahmani, B. M. (2015). Synthesis of ZnO nanoparticles by precipitation method. Orient. J. Chem, 31(2), 1219-1221.

Ibarra-Cruz, L. E., Legorreta-García, F., Juárez-Tapia, J. C., Cobos-Murcia, J. Á., & Rosario-Olguin, Y. (2024). Bohemita de tamaño micrométrico obtenida a partir de desechos urbanos. *Pädi Boletín Científico de Ciencias Básicas e Ingenierías del ICBI*.

Lopez, S. S., Cruz, V. R., Cobos-Murcia, J. A., Rodríguez, M. V., & Avila, J. H. (2015). Study of Iridium electrodeposition on Ti and A304. International Journal of Electrochemical Science, 10(12), 9933-9942.

Martins, J. M. A., Guimaraes, A. S., Dutra, A. J. B., & Mansur, M. B. (2020). Hydrometallurgical separation of zinc and copper from waste brass ashes using solvent extraction with D2EHPA. *Journal of Materials Research and Technology*, *9*(2), 2319-2330.

Nikpour, S., & Hedberg, Y. S. (2021). Using chemical speciation modelling to discuss variations in patch test reactions to different aluminium and chromium salts. *Contact dermatitis*, *85*(4), 415-420.

Oszczak-Nowińska, A., Świątkowski, A., Fronczyk, J., & Fuks, L. (2021). Adsorption of Cs-137 and Am-241 ions from aqueous solutions on bentonites. *Desalination and Water Treatment*, *214*, 433-439.

Pal, N., Banerjee, S., & Bhaumik, A. (2018). A facile route for the syntheses of Ni (OH) 2 and NiO nanostructures as potential candidates for non-enzymatic glucose sensor. Journal of colloid and interface science, 516, 121-127.

Pandey, M., Tripathi, S., Pandey, A. K., & Tripathi, B. D. (2014). Risk assessment of metal species in sediments of the river Ganga. *Catena*, *122*, 140-149.

PROPIÓNICO, C. E. (2009). SÍNTESIS DE ÓXIDOS TIPO PEROVSKITA MEDIANTE POLIMERIZACIÓN CON ÁCIDO CÍTRICO Y PROPIÓNICO SYNTHESIS OF PEROVKITE TYPE OXIDES BY POLYMERIZATION WITH CITRIC AND PROPIONIC ACID PEROVSKITAS TIPO ÓXIDO SÍNTESE POR POLIMERIZAÇÃO COM ÁCIDO. *Revista Colombiana de Química*, *38*(2).

Sheikhi, S., Aliannezhadi, M., & Tehrani, F. S. (2022). Effect of precursor material, pH, and aging on ZnO nanoparticles synthesized by one-step sol–gel method for photodynamic and photocatalytic applications. The European Physical Journal Plus, 137(1), 60.

Shulha, T. N., Serdechnova, M., Lamaka, S. V., Wieland, D. C. F., Lapko, K. N., & Zheludkevich, M. L. (2018). Chelating agent-assisted in situ LDH growth on the surface of magnesium alloy. Scientific Reports, 8(1), 16409.

Villanueva, L. E. T., Chávez-Urbiola, E. A., & Legorreta, F. (2018). Efectos del pH sobre la síntesis de di-tiourea cloruro de cadmio. *Pädi Boletín Científico de Ciencias Básicas e Ingenierías del ICBI*, *6*(11).

Wahab, R., Kim, Y. S., & Shin, H. S. (2009). Synthesis, characterization and effect of pH variation on zinc oxide nanostructures. Materials transactions, 50(8), 2092-2097.

Wanta, K. C., Tanujaya, F. H., Putra, F. D., Susanti, R. F., Gemilar, G. P., Astuti, W., & Petrus, H. T. B. M. (2020). Synthesis and characterization of nickel hydroxide from extraction solution of spent catalyst. Metalurgi, 35(3), 111-118.

Ziva, A. Z., Suryana, Y. K., Kurniadianti, Y. S., Nandiyanto, A. B. D., & Kurniawan, T. (2021). Recent progress on the production of aluminum oxide (Al2O3) nanoparticles: A review. Mechanical Engineering for Society and Industry, 1(2), 54-77.