GUÍA DOCENTE · SIMULACIENCIA

Guía docente: simulación de ajuste de reacciones

Ficha rápida

La simulación representa las reacciones químicas con átomos y moléculas: permite ajustar ecuaciones viendo cómo se reordenan los átomos, comprobar con una balanza las leyes de Lavoisier y de Proust, y encontrar el reactivo limitante y el rendimiento. Su uso principal es 3.º ESO, con aplicaciones en 4.º ESO y 1.º Bachillerato.

Dato	Detalle
Enlace	simulaciencia.es/simulaciones/ajuste-reaccion/
Cursos	3.º ESO (uso principal), 4.º ESO, 1.º Bachillerato; uso puntual en 2.º ESO y 2.º Bachillerato Química
Materia	Física y Química
Duración orientativa	15–20 minutos de explicación con la simulación proyectada
Material	Proyector o pizarra digital; funciona en navegador, también en móvil y tableta, sin instalar nada
Conocimientos previos	Átomos y moléculas, fórmulas químicas sencillas, reactivos y productos; en 4.º ESO y 1.º Bachillerato, masa molecular y mol
Accesibilidad	Tema oscuro, claro y de alto contraste (botón del engranaje, «Apariencia»)

Cómo funciona la simulación

La simulación tiene tres modos que se eligen en la tarjeta «Modo»: «Ajuste (Lavoisier)», «Proporciones definidas (Proust)» y «Reactivo limitante y rendimiento». En los tres, cada bolita es un átomo con su símbolo y su color, y cada grupo de bolitas unidas es una molécula o la unidad fórmula de un compuesto iónico. La tarjeta «Leyenda» muestra los elementos de la reacción elegida con su masa atómica.

Modo	Qué controla el docente	Qué muestra
Ajuste (Lavoisier)	«Reacción» (16 ecuaciones en tres grupos: «Sencillas», «Combustiones» y «Más difíciles»). Los coeficientes de cada sustancia, de 1 a 9, con los botones − y +. Interruptor «Recuento en vivo» y botones «✓ Comprobar», «▶ Ver la reacción» y «↺ Todo a 1»	La ecuación con sus coeficientes, las partículas de reactivos y productos, el «RECUENTO DE ÁTOMOS» por elemento con ✓ o ✗ y una «BALANZA (MASA TOTAL)» con la masa de cada lado
Proporciones definidas (Proust)	«Reacción»: siete compuestos (H_2O, H_2O_2, CO_2, CO, NH_3, FeS y MgO). Cantidad inicial de cada reactivo. Botones «▶ Reaccionar», «↺ Reiniciar» y «🗑️ Borrar tabla de experimentos»	El recipiente con las partículas, la proporción en masa de los dos elementos del compuesto, su composición centesimal, una gráfica de masas combinadas y una tabla con cada experimento
Reactivo limitante y rendimiento	«Reacción» (siete reacciones ajustadas). Cantidad inicial de cada reactivo, «Rendimiento» del 10 % al 100 % y «Tu predicción: ¿qué reactivo se agota?»	El recipiente con las partículas, una tabla «Inicial / Cambio / Final» con la masa final de cada sustancia, barras de cantidades y los resultados: reactivo limitante, reactivo en exceso, producto teórico, producto real y rendimiento

En los tres modos, el desplegable «Cada partícula representa» cambia la escala. Con «Una molécula o átomo (masa en u)» las cantidades son partículas y las masas, unidades de masa atómica. Con «Un mol (masa en g)» cada partícula dibujada es un mol y las masas se dan en gramos: los números no cambian, solo la unidad.

Cuatro elementos sostienen la explicación:

- **Los átomos que vuelan.** En el modo ajuste, «▶ Ver la reacción» lleva cada átomo de los reactivos a un hueco de los productos. Si la ecuación no está ajustada, algunos átomos se quedan en los reactivos rodeados de un anillo rojo («Sobran átomos») o quedan huecos discontinuos en los productos («Faltan átomos»). En el reactor, cada grupo de reactivos se deshace y sus átomos forman los productos.
- **El recuento de átomos.** Una fila por elemento con los átomos de reactivos y de productos. Con «Recuento en vivo» apagado, la tabla y la balanza muestran «?» hasta pulsar «✓ Comprobar».
- **La balanza y la barra de masa.** La balanza del modo ajuste se inclina hacia el lado con más masa y queda nivelada cuando la ecuación está ajustada. En el reactor, la barra «MASA TOTAL EN EL RECIPIENTE» reparte la masa entre las sustancias, y su longitud total no cambia mientras ocurre la reacción.
- **El mensaje de estado.** Bajo la ecuación aparece «✗ Sin ajustar…», «✓ Ecuación ajustada: se conservan los átomos y la masa» o, si los coeficientes tienen un divisor común, «✓ Ajustada, pero se puede simplificar».

En el modo Proust y en el modo limitante, los deslizadores de cantidad avanzan de coeficiente en coeficiente: con $2\ H_2 + O_2 \rightarrow 2\ H_2O$, el hidrógeno va de 2 en 2. Así el reactivo limitante siempre se agota por completo. El desplegable «¿Cómo funciona?», cerrado al empezar, resume los tres modos.

Uso en cada curso

En 3.º ESO la simulación es el soporte del ajuste de reacciones sencillas y de las leyes de Lavoisier y Proust como pruebas del modelo atómico-molecular. En 4.º ESO sirve para ajustar combustiones y para los primeros cálculos estequiométricos con moles, rendimiento incluido. En 1.º Bachillerato apoya las leyes ponderales (también la de Dalton), la composición centesimal, el reactivo limitante y el rendimiento. Los saberes citados son los del currículo LOMLOE de la Comunidad de Madrid.

Las masas que se citan son las que muestra la simulación, con las masas atómicas de la IUPAC redondeadas a dos decimales.

2.º ESO: uso puntual

13–14 años · 8th grade en EE. UU. · Year 9 en Reino Unido

No hay un saber de ajuste. El modo ajuste puede ilustrar «Cambios físicos y químicos de los sistemas materiales» e «Introducción a las reacciones químicas» (bloque C), y «Átomos y moléculas: sustancias simples y compuestas de uso frecuente y conocido» (bloque B). Con «Formación de agua» ya ajustada (2, 1 y 2), «▶ Ver la reacción» muestra que los átomos de hidrógeno y oxígeno se separan y se vuelven a unir formando una sustancia nueva, sin aparecer ni desaparecer.

3.º ESO: ajuste y leyes de Lavoisier y Proust

14–15 años · 9th grade en EE. UU. · Year 10 en Reino Unido

Saberes básicos. Bloque C: «Interpretación microscópica de las reacciones químicas» con el «Ajuste de reacciones químicas sencillas», y «Aplicación de la ley de conservación de la masa (Ley de Lavoisier) y de

la ley de las proporciones definidas (Ley de Proust): aplicación de estas leyes como evidencias experimentales que permitan validar el modelo atómico-molecular de la materia. Cálculos estequiométricos sencillos». Bloque B: «Masa atómica y masa molecular».

Objetivos. Ajustar ecuaciones sencillas cambiando solo los coeficientes. Explicar la conservación de la masa con la conservación de los átomos. Comprobar que un compuesto tiene siempre la misma proporción en masa de sus elementos.

Secuencia de explicación (15–20 min).

1. Modo ajuste, «Formación de agua» con todos los coeficientes a 1. El recuento marca H 2 frente a 2 ✓ y O 2 frente a 1 ✗; la balanza se inclina: 34,01 u frente a 18,02 u. Pulsar «▶ Ver la reacción»: «✗ Sobran átomos: 1 O».
2. Preguntar cómo arreglarlo. Si alguien propone escribir H_2O_2, explicar que eso es agua oxigenada, otra sustancia: la simulación solo deja cambiar coeficientes. Poner un 2 delante de H_2O: ahora el oxígeno cuadra, pero el hidrógeno no (2 frente a 4). «▶ Ver la reacción»: «✗ Faltan átomos: 2 H».
3. Poner un 2 delante de H_2. Aparece «✓ Ecuación ajustada: se conservan los átomos y la masa» y la balanza se nivela: 36,03 u a cada lado. Ver la reacción: «✓ Cada átomo encuentra su sitio». Enunciar la ley de Lavoisier.
4. Contar las partículas de cada caja: 3 moléculas en los reactivos y 2 en los productos. Las estadísticas, en cambio, dan 6 átomos a cada lado. Se conservan los átomos y la masa, no las moléculas.
5. Apagar «Recuento en vivo» y pedir que ajusten «Síntesis del amoniaco» (1, 3, 2) y «Oxidación del magnesio» (2, 1, 2) antes de pulsar «✓ Comprobar».
6. Modo Proust, «Agua (H_2O)», con los valores iniciales (4 H_2 y 4 O_2). «▶ Reaccionar»: se forman 4 H_2O y sobran 2 O_2. La tabla anota m(O)/m(H) = 7,94. Subir H_2 a 24 y repetir: se forman 8 H_2O, sobran 16 H_2 y la proporción sigue siendo 7,94. Los puntos de la gráfica caen sobre la misma recta: es la ley de Proust.

4.º ESO: ajuste de combustiones y estequiometría

15–16 años · 10th grade en EE. UU. · Year 11 en Reino Unido

Saberes básicos. Bloque C: «Ecuaciones químicas: ajuste de reacciones químicas y realización de predicciones cualitativas y cuantitativas basadas en la estequiometría», con «Ajuste de ecuaciones químicas. Cálculos estequiométricos. Rendimiento de una reacción», y «Descripción cualitativa de reacciones químicas de interés: reacciones de combustión». Bloque B: «Masa atómica y molecular. Concepto de mol. Constante de Avogadro».

Objetivos. Ajustar combustiones de hidrocarburos. Interpretar los coeficientes como proporción en moles. Calcular la cantidad de producto a partir de la de un reactivo y aplicar el rendimiento.

Secuencia de explicación (15–20 min).

1. Modo ajuste, «Combustión del metano». Ajustar en el orden habitual: primero el carbono (ya cuadra), luego el hidrógeno (2 delante de H_2O) y por último el oxígeno (2 delante de O_2). La balanza queda en 80,04 u a cada lado.
2. «Combustión del propano» con «Recuento en vivo» apagado: el alumnado propone los coeficientes (1, 5, 3 y 4) y se comprueban con «✓ Comprobar». Masa a cada lado: 204,09 u.
3. «Combustión del etano»: al ajustar el oxígeno sale 7/2 delante del O_2; se multiplica todo por 2 y queda 2, 7, 4 y 6. Al revés, si alguien ajusta el agua con 4, 2 y 4, la simulación avisa: «✓ Ajustada, pero se puede simplificar: divide los coeficientes entre 2».

4. Cambiar «Cada partícula representa» a «Un mol (masa en g)». La balanza pasa a gramos con los mismos números: la masa molar en g/mol coincide con la masa molecular en u.
5. Modo «Reactivo limitante y rendimiento», «Combustión del metano», con los valores iniciales: 4 mol CH_4 y 10 mol O_2. Pedir el CO_2 que se formará: 4 mol, es decir, 176,04 g. Pulsar «▶ Reaccionar» y comprobarlo en la tabla.
6. Bajar «Rendimiento» al 75 % en «Formación de agua» (8 mol H_2 y 5 mol O_2). Se forman 6 mol H_2O (108,09 g) de 8 teóricos (144,12 g): «Rendimiento = real / teórico · 100 = 75 %».

1.º Bachillerato: leyes ponderales, limitante y rendimiento

16–17 años · 11th grade en EE. UU. · Year 12 en Reino Unido

Saberes básicos. Bloque B: «Aplicación de las leyes fundamentales de la química para comprender las relaciones estequiométricas en las reacciones químicas y en la composición de los compuestos», con «Ley de Lavoisier de conservación de la masa, ley de Proust de las proporciones definidas y ley de Dalton de las proporciones múltiples. Composición centesimal de un compuesto» y «Cálculos estequiométricos en las reacciones químicas. Riqueza de un reactivo. Rendimiento de una reacción. Reactivo limitante y reactivo en exceso». También «Reacciones de síntesis, sustitución, doble sustitución, descomposición y combustión» y «Observación de distintos tipos de reacciones y comprobación de su estequiometría».

Objetivos. Relacionar las leyes ponderales con la teoría atómica de Dalton. Calcular la composición centesimal. Identificar el reactivo limitante y calcular el producto teórico, el exceso y el rendimiento.

Secuencia de explicación (15–20 min).

1. Modo Proust, «Agua (H_2O)»: la composición centesimal es 11,2 % H y 88,8 % O, y m(O)/m(H) = 7,94. Hacer dos o tres experimentos con cantidades distintas y comprobar que la proporción no cambia.
2. Cambiar a «Agua oxigenada (H_2O_2)»: m(O)/m(H) = 15,87, justo el doble de 7,94. Repetir con «Monóxido de carbono (CO)» (1,33) y «Dióxido de carbono (CO_2)» (2,66). Enunciar la ley de las proporciones múltiples y explicarla con átomos: el segundo compuesto tiene el doble de átomos de oxígeno por cada átomo del otro elemento.
3. Modo «Reactivo limitante y rendimiento», «Formación de agua», con los valores iniciales (8 H_2 y 5 O_2). Pedir una predicción en «Tu predicción: ¿qué reactivo se agota?». Mucha gente elige O_2 porque hay menos. Reaccionar: el limitante es H_2, «En exceso: O_2 (solo hacen falta 4 de 5)».
4. Resolver el mismo caso en la pizarra con «Un mol (masa en g)»: 16,13 g de H_2 y 159,99 g de O_2 dan 144,12 g de H_2O y sobran 32,00 g de O_2. La barra de masa total marca 176,12 g antes y después.
5. Poner 8 H_2 y 4 O_2: «Proporción estequiométrica: no hay reactivo limitante ni en exceso».
6. Volver a 8 H_2 y 5 O_2 y bajar «Rendimiento» al 75 %: se forman 6 H_2O y quedan sin reaccionar 2 H_2 y 2 O_2. Comentar que en la industria el rendimiento baja por reacciones incompletas, reacciones secundarias y pérdidas al separar el producto.

2.º Bachillerato Química: repaso puntual

17–18 años · 12th grade en EE. UU. · Year 13 en Reino Unido

No hay un saber específico. Puede servir de repaso antes de los «Cálculos estequiométricos y volumetrías redox» (bloque B, 5). La simulación solo ajusta por tanteo y no trabaja el «Método del ion-electrón»; conviene recordar que ese método también se basa en conservar los átomos, y además la carga.

Concepciones alternativas que ayuda a corregir

La simulación ataca sobre todo la idea de que ajustar es un juego de números sin relación con los átomos. Cada fila indica la idea previa frecuente y cómo desmontarla con la simulación.

Idea del alumnado	Idea correcta	Cómo mostrarlo
«Para ajustar se pueden cambiar los subíndices»	Cambiar un subíndice cambia la sustancia; solo se cambian los coeficientes	Modo ajuste: solo hay botones para los coeficientes. Modo Proust: H_2O y H_2O_2 tienen proporciones distintas (7,94 y 15,87) porque son sustancias distintas
«En una reacción se pierde masa (al quemar algo, pesa menos)»	La masa total se conserva porque se conservan los átomos	«Combustión del metano» ajustada: 80,04 u a cada lado de la balanza. En el reactor, la barra de masa total no cambia mientras reacciona
«Si la ecuación está ajustada, hay las mismas moléculas a cada lado»	Se conservan los átomos, no las moléculas	$2\ H_2 + O_2 \rightarrow 2\ H_2O$: 3 moléculas frente a 2, pero 6 átomos a cada lado
«Los coeficientes indican la proporción en masa»	Indican la proporción en partículas o en moles	$2\ H_2 + O_2$: hay el doble de moléculas de H_2, pero el O_2 aporta 32,00 u frente a 4,03 u
«El reactivo limitante es del que hay menos»	Es el que se agota antes según la proporción de la ecuación	Valores iniciales del modo limitante: con 8 H_2 y 5 O_2, el limitante es H_2
«Si añado más de un reactivo, siempre se forma más producto»	Si ese reactivo está en exceso, el producto no cambia	Modo Proust, agua: con 4 O_2 fijos, pasar de 8 a 24 H_2 no cambia las 8 H_2O; solo aumenta lo que sobra
«Con un rendimiento del 100 % no sobra nada»	Con el 100 % se agota el limitante; el reactivo en exceso sigue sobrando	Valores iniciales del modo limitante: sobra 1 O_2 con rendimiento del 100 %
«La ecuación está mejor ajustada con números más grandes»	Se usan los coeficientes enteros más pequeños	«Formación de agua» con 4, 2 y 4: «Ajustada, pero se puede simplificar: divide los coeficientes entre 2»

Simplificaciones que conviene conocer

La simulación prioriza la conservación de los átomos y la proporción de la ecuación, y para ello simplifica la forma de las moléculas, el mecanismo y las cantidades. Conviene conocer estas licencias para no reforzar ideas incorrectas sin querer.

1. **Las moléculas son esquemas planos.** Las posiciones de los átomos son aproximadas y en dos dimensiones: el metano se dibuja en cruz y no como un tetraedro, y los ángulos de enlace no son los reales.
2. **Sólidos iónicos, metales y no metales sólidos son partículas sueltas.** NaCl, MgO, Fe_2O_3, Al_2O_3, $CaCO_3$, $KClO_3$, FeS, CaO y KCl se dibujan como una unidad fórmula, aunque son redes cristalinas. Los metales (Na, Mg, Al, Fe), el carbono y el azufre aparecen como átomos aislados; el azufre real forma moléculas S_8.
3. **Los átomos vuelan directamente a los productos.** No se representan choques, rotura de enlaces paso a paso, intermedios ni energía. Para eso está la simulación de velocidad de reacción.
4. **No todas las ecuaciones ocurren tal como se escriben.** Algunas se han elegido por su valor didáctico: el agua oxigenada no se fabrica uniendo H_2 y O_2, y el NO_2 se forma en dos pasos. Tampoco se indican los estados físicos ni las condiciones.

5. **Las cantidades van de coeficiente en coeficiente.** En los modos Proust y limitante, cada reactivo se elige en múltiplos de su coeficiente (con un máximo de 24 partículas), para que el limitante se agote siempre por completo. En el laboratorio las cantidades son continuas.
6. **El rendimiento se modela parando la reacción.** Con un rendimiento menor del 100 %, la reacción se detiene antes y quedan sin reaccionar parte de los dos reactivos. En la realidad influyen también las reacciones secundarias y las pérdidas al separar el producto. Además, el producto real se redondea a partículas enteras: con pocas partículas el rendimiento obtenido puede no coincidir con el elegido, y entonces se indica «(se redondea a partículas enteras)».
7. **Un mol por partícula.** Con «Un mol (masa en g)» cada partícula dibujada representa $6{,}022 \cdot 10^{23}$ partículas. Las cantidades son siempre números enteros de moles.
8. **Masas atómicas con más decimales que los del libro.** Se usan las de la IUPAC (H = 1,008; O = 15,999…). Por eso m(O)/m(H) en el agua sale 7,94 y no 8, como con H = 1 y O = 16. Conviene avisar si el alumnado comprueba los cálculos con masas redondeadas.
9. **Los coeficientes van de 1 a 9.** Basta para todas las ecuaciones de la lista, cuyo coeficiente mayor es 7 (etano).

Ficha de actividades del alumnado

La ficha de actividades sigue el esquema predice, observa y explica. Cada actividad enlaza a la simulación ya preparada, así que funciona en el aula de informática, con tabletas o como tarea en casa. Se descarga en Word y LibreOffice para adaptarla.

Curso	Actividades	Duración orientativa
3.º ESO	Antes de empezar, actividades 1 a 4, problemas 1 a 3 de Aplica lo aprendido, Revisa tus ideas y Autoevaluación	Una sesión de 50–55 minutos
4.º ESO	Actividades 2, 5 y 6 y Aplica lo aprendido completo	Una sesión
1.º Bachillerato	Actividades 4 a 6 y Para ampliar	Una sesión

La tabla de «Antes de empezar» recoge cinco ideas previas sobre las reacciones. Conviene no corregirla al principio: el alumnado vuelve a ella en «Revisa tus ideas».

Soluciones

Apartado	Solución
Antes de empezar	Todas falsas. a) Cambiar un subíndice cambia la sustancia (actividad 1). b) Se conservan los átomos, no las moléculas (actividad 3). c) La masa se conserva; si el gas escapa, falta en la balanza, pero no ha desaparecido (actividad 3). d) Un compuesto tiene siempre la misma proporción (actividad 4). e) Uno se agota antes: el limitante (actividad 5)
Actividad 1	1, 1, 1: H 2/2, O 2/1, 34,01 u frente a 18,02 u, «✗ Sin ajustar» y «Sobran átomos: 1 O». 1, 1, 2: H 2/4, O 2/2, «Faltan átomos: 2 H». 2, 1, 2: H 4/4, O 2/2, 36,03 u a cada lado, «✓ Ecuación ajustada». H_2O_2 es agua oxigenada, otra sustancia. La balanza se nivela porque hay los mismos átomos a cada lado
Actividad 2	$N_2 + 3\,H_2 \rightarrow 2\,NH_3$. $2\,Mg + O_2 \rightarrow 2\,MgO$. $CH_4 + 2\,O_2 \rightarrow CO_2 + 2\,H_2O$. $C_3H_8 + 5\,O_2 \rightarrow 3\,CO_2 + 4\,H_2O$. Orden cómodo: carbono, hidrógeno y por último oxígeno, porque el O_2 es una sustancia simple y su coeficiente no descuadra otros elementos
Actividad 3	Reactivos: 3 moléculas, 6 átomos, 36,03 u. Productos: 2 moléculas, 6 átomos, 36,03 u. Ley de Lavoisier: en una reacción química la masa total se conserva, porque los átomos solo se reorganizan

Apartado	Solución
Actividad 4	$4\ H_2 + 4\ O_2$: $4\ H_2O$, sobran $2\ O_2$. $24\ H_2 + 4\ O_2$: $8\ H_2O$, sobran $16\ H_2$. $8\ H_2 + 12\ O_2$: $8\ H_2O$, sobran $8\ O_2$. m(O)/m(H) = 7,94 siempre: ley de Proust. Sobra un reactivo cuando no está en la proporción 2 : 1 en moléculas
Actividad 5	Limitante: CH_4. Los 4 CH_4 necesitan 8 O_2 y hay 10, así que se gasta todo el CH_4 y sobran 2 O_2 (en exceso). Se forman 4 CO_2 (176,04 u) y 8 H_2O. No basta: con 4 CH_4 y 6 O_2 el limitante es el O_2 aunque haya más moléculas, porque cada CH_4 necesita 2 O_2 (se forman 3 CO_2 y sobra 1 CH_4). El limitante depende de la proporción de la ecuación
Actividad 6	Limitante: H_2 (8 mol necesitan 4 mol de O_2; sobra 1 mol). Teórico: 8 mol de H_2O = 144,12 g. Real: 6 mol = 108,09 g. Rendimiento 75 %. Hay reacciones secundarias, pérdidas al separar y purificar, y reacciones que no se completan
Aplica lo aprendido	1) $4\ Fe + 3\ O_2 \rightarrow 2\ Fe_2O_3$; $2\ C_2H_6 + 7\ O_2 \rightarrow 4\ CO_2 + 6\ H_2O$. 2) 44 g, ley de Lavoisier. 3) 5 g, ley de Proust. 4) Limitante O_2 (2 mol necesitan 4 mol de H_2); se forman 4 mol de H_2O y sobran 2 mol de H_2
Para ampliar	1) 11,2 % de H y 88,8 % de O. 2) En H_2O_2, m(O)/m(H) = 15,87, el doble que en el agua: relación 2 : 1, ley de las proporciones múltiples de Dalton

Juan Ramón Grijota · SimulaCiencia. Guía publicada bajo licencia CC BY-SA 4.0: puedes adaptarla y compartirla citando la autoría y con la misma licencia. Versión actualizada y simulación en simulaciencia.es/guias/ajuste-reaccion/.