

# Excel como herramienta para comprobar las respuestas de problemas de equilibrios múltiples en Química Analítica

**Roberto Fernández-Maestre**

Universidad de Cartagena, Campus de San Pablo, Programa de Química, Cartagena, Bolívar, Colombia

(\*) [rfernandezm@unicartagena.edu.co](mailto:rfernandezm@unicartagena.edu.co)

**Recibido:** 08/01/2023

**Aceptado:** 17/04/2023

## Resumen

Resolver equilibrios complejos es uno de los temas más difíciles en Química Analítica para los estudiantes. Ejemplos de estos problemas son la obtención de las concentraciones de  $\text{OH}^-$  y  $\text{H}_3\text{O}^+$  en soluciones de bases muy débiles o la solubilidad de sales básicas. Los estudiantes pueden tardar más de dos horas en encontrar la solubilidad de una sal básica a un pH dado cuando el anión reacciona con agua. Al final, probablemente haya errores en los resultados, desconocidos para los estudiantes. Se presenta un archivo simple de Excel y un video corto para verificar estos resultados siguiendo sencillos pasos.

**Palabras claves:** Educación de pregrado; Química analítica; Aprendizaje basado en computadoras; Química de Solución Acuosa; Equilibrio químico

## Abstract

**Excel as a tool to verify the answers of multiple equilibrium problems in Analytical Chemistry.** Solving complex equilibria is one of the most difficult topics in Analytical Chemistry for students. Examples of these problems are obtaining the concentrations of  $\text{OH}^-$  and  $\text{H}_3\text{O}^+$  in very weak base solutions or the solubility of basic salts. Students can take more than two hours to find the solubility of a basic salt at a given pH when the anion reacts with water. At the end, there are probably errors in the results, unknown to students. A simple Excel file and a short video are presented to verify these results following simple steps.

**Keywords:** Undergraduate Education; Analytical chemistry; Computer-Based Learning; Aqueous Solution Chemistry; Chemical equilibrium

## Introducción

Para los estudiantes, resolver equilibrios complejos es uno de los temas más difíciles en Química Analítica, incluso cuando pocas especies están involucradas. La solución a este tipo de problema se informa en la literatura; por ejemplo, el cálculo de las concentraciones de  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{OH}^-$  y  $\text{H}_3\text{O}^+$  en el sistema  $\text{Mg}(\text{OH})_2$  o la solubilidad del oxalato de calcio a un pH conocido o desconocido. Un capítulo entero está dedicado a estos problemas en los libros de texto de química analítica<sup>1</sup>. Estos problemas se pueden resolver con Excel<sup>2,3</sup>, pero se requiere un conocimiento considerable de este programa, del que carecen la mayoría de los estudiantes principiantes de química. Por ejemplo, De Levie enumera diecinueve pasos en Excel, distribuidos en cuatro páginas, solo para la construcción de un diagrama de distribución para un ácido monoprótico. Para un ácido diprótico, se requieren trece pasos adicionales y otros nueve para un ácido triprótico. De Levie utiliza casi seis páginas para calcular la solubilidad del  $\text{HgS}$  en función del pH con Excel y trazar los diagramas de distribución<sup>3</sup>. Algo similar ocurre con Holler & Crouch<sup>2</sup>. Por lo tanto, la literatura disponible utiliza complicadas hojas de

cálculo de Excel para calcular las concentraciones, reemplazando el trabajo del estudiante, y no se utiliza para verificar los resultados. Sin embargo, el objetivo educativo de los estudiantes debe ser resolver problemas de química siguiendo un proceso lógico y no mecánico. Se han propuesto otros enfoques sistemáticos para calcular la concentración de especies químicas en sistemas de multiequilibrios con la ayuda de hojas de cálculo<sup>4-8</sup>, software de código abierto<sup>6-9</sup>, y software comercial<sup>10</sup>. Estos enfoques pueden ser utilizados por los estudiantes para verificar las respuestas a los problemas resueltos manualmente por ellos, pero son largos y complicados.

El procedimiento para resolver manualmente equilibrios complejos también es largo y complicado. Los estudiantes pueden tardar más de dos horas en encontrar la solubilidad de una sal básica a un pH dado cuando el anión reacciona con el disolvente, el agua. Al final, después de un largo procedimiento, probablemente haya errores en los resultados, desconocidos para los estudiantes. En esta comunicación, se presenta un algoritmo de Excel simple y un video (menor de 3 min.) para comprobar estos resultados siguiendo sencillos

pasos. El archivo de Excel se puede usar con sales que forman ácidos monopróticos, dipróticos y tripróticos débiles, pero se puede actualizar a especies con un mayor número de protones ácidos o problemas que involucran otros tipos de equilibrios múltiples, como la formación de complejos. El archivo no pretende reemplazar el trabajo del estudiante, esto es, calcular las concentraciones de equilibrio, sino verificarlos después de que se hayan calculado.

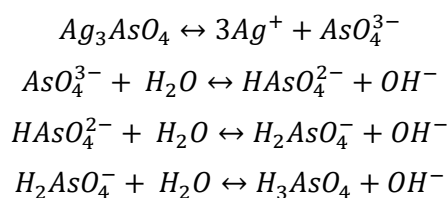
### Metodología

En el ejemplo 1, se calcula la solubilidad de  $Ag_3AsO_4$  y las respuestas se verifican con el archivo Excel. El procedimiento es (Apéndice 1A, Material complementario):

- 1) Encontrar el ácido que forma el anión básico producido por la disociación de la sal básica. Los siguientes pasos son automáticos:
- 2) La distribución de la especie se grafica en función del pH y se obtiene la fracción molar de cada especie,  $\alpha$ , formada por la desprotonación del ácido.
- 3)  $C_T$ , la concentración total, se calcula sumando las concentraciones de las especies.
- 4) La concentración de cada especie se encuentra usando  $[i] = \alpha_i * C_T$  donde  $i$  es una especie dada.
- 5) Finalmente, las concentraciones calculadas se verifican comparando con las encontradas en el paso 4.

**Ejemplo 1.** Calcular la solubilidad de  $Ag_3AsO_4$  ( $K_{ps}^0 = 3.96 \times 10^{-24}$ )<sup>11</sup> tamponado a pH 10,00 considerando la reacción de los aniones arseniato con agua (ignorando los problemas derivados de la fuerza iónica). Los siguientes son los pasos recomendados<sup>1</sup>:

1. Ecuaciones pertinentes para los equilibrios:



2. Incógnita: la solubilidad es  $[Ag^+]/3$

3. Ecuaciones correspondientes:

$$K_{ps} = [AsO_4^{3-}][Ag^+]^3 = 3.96 \times 10^{-24} \quad (1)$$

$$K_{a1} = \frac{[H_2AsO_4^-][H_3O^+]}{[HAsO_4^{2-}]} = 5.8 \times 10^{-3} \quad (2)$$

$$K_{a2} = \frac{[HAsO_4^{2-}][H_3O^+]}{[H_2AsO_4^-]} = 1.1 \times 10^{-7} \quad (3)$$

$$K_{a3} = \frac{[AsO_4^{3-}][H_3O^+]}{[HAsO_4^{2-}]} = 3.2 \times 10^{-12} \quad (4)$$

4. Ecuación de balance de masa. Ya que el precipitado es la fuente de todas las especies con  $AsO_4$ :

$$\frac{[Ag^+]}{3} = [AsO_4^{3-}] + [HAsO_4^{2-}] + [H_2AsO_4^-] + [H_3AsO_4] \quad (5)$$

5. Ecuación de balance de carga: Se desconoce la composición del tampón por lo que no se puede establecer una ecuación de balance de carga.

6. Hay cinco incógnitas

$$[H_3AsO_4], [H_2AsO_4^-], [HAsO_4^{2-}], [AsO_4^{3-}] \text{ y } [Ag^+]$$

y cinco ecuaciones, por lo que se puede encontrar una solución.

7. Aproximaciones para simplificar los cálculos. Suponemos que, a pH 10,  $[H_3AsO_4]$  es pequeño y podemos despreciarlo, por lo que podemos reescribir la ec. 5 como:

$$\frac{[Ag^+]}{3} = [AsO_4^{3-}] + [HAsO_4^{2-}] + [H_2AsO_4^-] \quad (6)$$

Sin embargo, esta aproximación se ignora porque este problema se puede resolver sin ella.

8. Se reescriben las ecs. 1, 3 y 4 y se reemplaza la concentración de iones hidrógeno,  $1.0 \times 10^{-10}$ :

$$[AsO_4^{3-}] = \frac{3.96 \times 10^{-24}}{[Ag^+]^3} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} [H_2AsO_4^-] &= \frac{1.0 \times 10^{-10} [HAsO_4^{2-}]}{1.1 \times 10^{-7}} \\ &= 9.1 \times 10^{-4} [HAsO_4^{2-}] \quad (8) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [HAsO_4^{2-}] &= \frac{1.0 \times 10^{-10} [AsO_4^{3-}]}{3.2 \times 10^{-12}} \\ &= 31.2 [AsO_4^{3-}] \quad (9) \end{aligned}$$

Se sustituye (7) en (9):

$$\begin{aligned} [HAsO_4^{2-}] &= 31.2 \times \frac{3.96 \times 10^{-24}}{[Ag^+]^3} \\ &= \frac{1.24 \times 10^{-22}}{[Ag^+]^3} \quad (10) \end{aligned}$$

Se sustituye (10) en (8):

$$\begin{aligned} [H_2AsO_4^-] &= 9.1 \times 10^{-4} \times \frac{1.24 \times 10^{-22}}{[Ag^+]^3} \\ &= \frac{1.13 \times 10^{-25}}{[Ag^+]^3} \quad (11) \end{aligned}$$

Se sustituye (7), (10) y (11) en (6):

$$\begin{aligned} \frac{[Ag^+]}{3} &= \frac{3.96 \times 10^{-24}}{[Ag^+]^3} + \frac{1.24 \times 10^{-22}}{[Ag^+]^3} \\ &\quad + \frac{1.13 \times 10^{-25}}{[Ag^+]^3} \quad (12) \end{aligned}$$

Se resuelve (12) para la solubilidad,  $[Ag^+]/3$ :

$$[Ag^+] = \sqrt[4]{3(3.96 \times 10^{-24} + 1.24 \times 10^{-22} + 1.13 \times 10^{-25})} = 4.43 \times 10^{-6} M$$

$$\frac{[Ag^+]}{3} = \text{solubilidad} = 1.48 \times 10^{-6} M$$

9. Se calculan las concentraciones de  $AsO_4^{3-}$ ,  $HAsO_4^{2-}$ , y  $H_2AsO_4^-$  y se reemplaza  $[Ag^+]$  en las ecs. 7, 10 y 11 con  $4.43 \times 10^{-6}$ :

$$[AsO_4^{3-}] = \frac{3.96 \times 10^{-24}}{(4.43 \times 10^{-6})^3} = 4.56 \times 10^{-8} M \quad (13)$$

$$[HAsO_4^{2-}] = \frac{1.24 \times 10^{-22}}{(4.43 \times 10^{-6})^3} = 1.43 \times 10^{-6} M \quad (14)$$

$$[H_2AsO_4^-] = \frac{1.13 \times 10^{-25}}{(4.43 \times 10^{-6})^3} = 1.30 \times 10^{-9} M \quad (15)$$

Se sustituye el valor de  $[H_2AsO_4^-]$ , que se encuentra en la ec 15, en la expresión de  $K_{a1}$  y se resuelve para  $[H_3AsO_4]$ :

$$[H_3AsO_4] = \frac{1.30 \times 10^{-9} \times 1.0 \times 10^{-10}}{5.8 \times 10^{-3}} = 2.24 \times 10^{-17} M \quad (16)$$

Este valor se puede despreciar en la ec. 5 cuando se suma con los resultados de las ecs. 13-15, como se anticipó en el paso 7. La solubilidad obtenida en la etapa 8 se confirma sumando, en la ec. 5, los valores para las especies de arsénico en las ecs. 13-16.

Como se puede ver, este es un ejercicio largo, resumido aquí, y los estudiantes no saben si los resultados son correctos y dónde puede estar el error en esta extensa, para ellos, red de cálculos. Sin embargo, se puede utilizar un archivo de Excel (material complementario) para verificar los resultados siguiendo sencillos pasos de copiar y pegar. El procedimiento para este ejemplo es: 1) Seleccionar el ácido (ácido arsénico) que forma el anión básico,  $AsO_4^{3-}$ , producido por la disociación de la sal básica (arseniato de plata). Los siguientes pasos son automáticos: 2) Graficar la distribución de las especies de este ácido en función del pH y obtener las fracciones molares de las especies,  $\alpha$ . 3)  $C_T$ , la concentración total de las especies del ácido se calcula sumando las concentraciones obtenidas en el problema,  $[AsO_4^{3-}]$ ,  $[HAsO_4^{2-}]$ ,  $[H_2AsO_4^-]$ , y  $[H_3AsO_4]$ . 4) La concentración de cada especie se encuentra usando  $[i] = \alpha_i^* C_T$  donde  $i$  es una especie dada. 5) Las concentraciones encontradas en el problema se verifican comparando con las encontradas en el paso 4. En este caso, las diferencias están por debajo del 2%, lo que indica a los estudiantes que su procedimiento es probablemente correcto. Si se encuentran diferencias superiores al 2%, los estudiantes deben comprobar que no hay errores y que se utilizan todas las cifras significativas en los cálculos. El proce-

dimiento detallado para comprobar las respuestas de este ejemplo con Excel se encuentra en el Apéndice 1A (material complementario). Curtipot le permite verificar estas concentraciones a una fuerza iónica dada, pero requiere una mejor comprensión de Excel y el programa Curtipot<sup>12</sup>.

Un ejemplo similar se resuelve para un compuesto que forma un ácido monoprótico, yodato de bario (archivo Excel y Apéndice 2, material complementario). Un breve video explicativo (menor de 3 min.) sobre cómo usar el archivo Excel para verificar las respuestas de un problema sobre la solubilidad del fosfato de calcio (que forma un ácido triprótico al reaccionar con agua) a pH 10 está disponible en Internet en la dirección <https://youtu.be/XsTkDY7tTZg>

### Comentarios finales

La resolución de estos equilibrios complejos es uno de los temas más difíciles en Química Analítica para los estudiantes. El procedimiento para resolver estos equilibrios es largo y complicado. Luego de resolver uno de estos largos problemas, los estudiantes pueden haber cometido errores que pasan desapercibidos para ellos. Este artículo permite verificar rápidamente los resultados obtenidos de modo que los estudiantes puedan corregir sus errores, en caso de haberlos, sin tener que rehacer todos los cálculos. Este trabajo no busca reemplazar el trabajo del estudiante sino brindar una herramienta que le permita, de forma rápida y sencilla, establecer la veracidad de los cálculos hechos.

### Conflictos de interés

El autor declara que no existe ningún conflicto de intereses que ponga en peligro la validez de los resultados.

### Información suplementaria

- **Apéndice 1.** Instrucciones para usar el archivo de Excel con compuestos que forman un ácido triprótico, diprótico o monoprótico con agua.

- **Apéndice 2.** Solución al problema: Encuentra la solubilidad de  $Ba(IO_3)_2$

### Información electrónica suplementaria

Los siguientes materiales están disponibles en línea:

- **Video explicativo** (<https://youtu.be/oVQncm023lw> en español; in English <https://youtu.be/XsTkDY7tTZg>), procedimiento para usar el archivo Excel.

- **Archivo Excel** para comprobar las respuestas de problemas de equilibrios múltiples. <http://erevistas.saber.ula.ve/index.php/avancesenquimica/article/view/18925/21921930313>

### Referencias

1. DA Skoog, DM West, FJ Holler, SR. Crouch. *Fundamentals of Analytical Chemistry*. 9<sup>th</sup> ed., Chapter 11. Cengage Learning, Boston, USA (2014).
2. FJ Holler, SR Crouch. *Applications of Microsoft Excel in Analytical Chemistry*. Cengage Learning, Boston, USA (2013).

3. R De Levie. *How to Use Excel® in Analytical Chemistry and in General Scientific Data Analysis*. Cambridge University Press, UK (2004).
4. A Raviolo. Using a spreadsheet scroll bar to solve equilibrium concentrations. **J. Chem. Educ.**, **89**, 1411-1415 (2012).
5. JJ Baeza-Baeza, MC García-Álvarez-Coque. Systematic approach for calculating the concentrations of chemical species in multiequilibrium problems: inclusion of the ionic strength effects. **J. Chem. Educ.**, **89**, 900-904 (2012).
6. JJ Baeza-Baeza, O Pini, FF Pérez-Pla, MC García-Álvarez-Coque, Solving Chemical Equilibria in Titrimetry with the Inclusion of Ionic Strength Using OCTAVE and EXCEL. **World J. Chem. Ed.**, **9**, 81-87 (2021).
7. DA Vander Griend. Equilibrator: modeling chemical equilibria with Excel. **J. Chem. Educ.**, **88**, 1727-1729 (2011).
8. JL Guinon, J García-Anton, V Perez-Herranz. Spreadsheet techniques for evaluating the solubility of sparingly soluble salts of weak acids. **J. Chem. Educ.**, **76**, 1157-1160 (1999).
9. C Paolini, S Bhattacharjee, WF Coleman, EW Fedosky. Solving chemical equilibrium problems online. **J. Chem. Educ.**, **87**, 456 (2010).
10. MB Cutlip, M Shacham. *Problem Solving in Chemical and Biochemical Engineering with POLYMATH, EXCEL, and MATLAB*. Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, USA (2008).
11. JS Lee, JO Nriagu. Stability constants for metal arsenates. **Environ. Chem.**, **4**, 123-133 (2007).
12. IGR Gutz. *Curtipot pH Calculator + Acid-Base Titration*. <http://www.iq.usp.br/gutz/Curtipot.html> Consultado: 08 de diciembre, 2022.

## Apéndice 1

**A. PROCEDIMIENTO PARA COMPROBAR, USANDO EXCEL, LAS RESPUESTAS DEL EJEMPLO 1:** Calcular la solubilidad de  $\text{Ag}_3\text{AsO}_4$ , arseniato de plata, tamponado a pH 10.00 considerando la reacción de aniones arseniato con agua.

- 1) Los valores de  $K_a$  del ácido (ácido arsénico) formado por la reacción del anión arseniato de plata,  $\text{AsO}_4^{3-}$ , con agua, se copiaron en las celdas I3-K3 en el archivo Excel (hoja del ácido triprótico, material complementario). Las concentraciones correspondientes de las especies, encontradas a partir de la solución del problema asignado por el profesor, se copiaron en las celdas J27-M27. Los siguientes pasos son automáticos.
- 2)  $C_T$ , la concentración total, en la celda I27, se encontró automáticamente sumando las concentraciones de las especies,  $[\text{AsO}_4^{3-}]$ ,  $[\text{HAsO}_4^{2-}]$ ,  $[\text{H}_2\text{AsO}_4^-]$ , y  $[\text{H}_3\text{AsO}_4]$ , (en las celdas J27-M27).
- 3) Los valores  $\alpha_i$ , la fracción molar de  $[\text{AsO}_4^{3-}]$ ,  $[\text{HAsO}_4^{2-}]$ ,  $[\text{H}_2\text{AsO}_4^-]$  y  $[\text{H}_3\text{AsO}_4]$  en función de los datos de pH a pH 10 (celdas D38 a G38, respectivamente), se copiaron en las celdas J33-M33. Estos valores y los de la solución del problema, comparados uno al

lado del otro en las celdas J33-M33 y J34-M34, están muy cerca y sus diferencias son menores del 2% (valores absolutos), lo que indica que el problema probablemente esté bien resuelto.

- 4) La concentración de cada especie usando un valor  $\alpha_i$  en Excel, encontrado usando  $[i] = \alpha_i \cdot C_T$  donde  $i$  es una especie dada, se calculó en las celdas J28-M28. Las concentraciones encontradas en el problema (en las celdas J27 a M27) se comprueban comparándolas con las encontradas en Excel. Las diferencias porcentuales entre estos valores se muestran en las celdas J29-M29. Las diferencias están por debajo del 2% (valores absolutos), lo que indica a los estudiantes que su procedimiento es probablemente correcto. Si se encuentran diferencias superiores al 2% en los ítems 3 o 4, los estudiantes deben verificar que no haya errores en la solución del problema o que se utilicen todas las cifras significativas en los cálculos.

## B. PROCEDIMIENTO PARA COMPROBAR, CON EXCEL, LAS RESPUESTAS PARA LA DISOCIACIÓN DE UNA SAL QUE FORMA UN ANIÓN QUE PRODUCE UN ÁCIDO TRIPRÓTICO

- 1) En el archivo Excel, hoja de cálculo de ácido triprótico, en las celdas I3 a K3, reemplaza los valores de  $K_a$  del ácido triprótico formado por la reacción con agua del anión proveniente de la disociación de la sal.
- 2) Pegue las concentraciones correspondientes de la especie, encontradas en la solución del problema asignado por el profesor, en las celdas J27-M27.  $C_T$ , la concentración total, se calcula automáticamente en la celda I27 sumando estas concentraciones.
- 3) Copie los valores  $\alpha_i$ , la fracción molar de cada especie en función de los datos de pH, al pH de interés, de las celdas correspondientes (columnas D, E, F y G) en las celdas J33-M33.
- 4) La concentración de cada especie obtenida con Excel aparece ahora en las celdas J28-M28, usando  $[i] = \alpha_i \cdot C_T$  donde  $i$  es una especie dada.
- 5) Compruebe las diferencias porcentuales que se muestran en las celdas J29 a M29. Las diferencias deben estar por debajo del 2% (valores absolutos), indicando a los estudiantes que el problema se resolvió correctamente. Si se encuentra una diferencia  $> 2\%$ , verifique que se utilicen todas las cifras significativas en los cálculos o busque errores en la solución del problema.

## C. PROCEDIMIENTO PARA COMPROBAR, CON EXCEL, LAS RESPUESTAS PARA LA DISOCIACIÓN DE UNA SAL QUE FORMA UN ANIÓN QUE PRODUCE UN ÁCIDO DIPRÓTICO

- 1) En el archivo Excel, hoja de cálculo de ácido diprótico, en las celdas H3 e I3, reemplaza los valores de  $K_a$  del ácido diprótico formado por la reacción con agua del anión proveniente de la disociación de la sal.
- 2) Pegue las concentraciones correspondientes de la especie, encontradas en la solución del problema asignado por el profesor,

en las celdas I28-K28.  $C_T$ , la concentración total, se calcula automáticamente en la celda H28 sumando estas concentraciones.

- 3) Copie los valores  $\alpha$ , la fracción molar de cada especie en función de los datos de pH, al pH de interés, de las celdas correspondientes (columnas D-F) en las celdas I34-K34.
- 4) La concentración de cada especie obtenida con Excel aparece ahora en las celdas I29-K29, usando  $[i] = \alpha_i \cdot C_T$  donde  $i$  es una especie dada.
- 5) Compruebe las diferencias porcentuales que se muestran en las celdas I30 a K30. Las diferencias deben estar por debajo del 2% (valores absolutos), indicando a los estudiantes que el problema se resolvió correctamente. Si se encuentra una diferencia  $>2\%$ , verifique que se utilicen todas las cifras significativas en los cálculos o busque errores en la solución del problema.

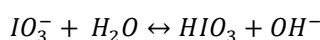
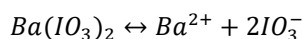
#### D. PROCEDIMIENTO PARA COMPROBAR, CON EXCEL, LAS RESPUESTAS PARA LA DISOCIACIÓN DE UNA SAL QUE FORMA UN ANIÓN QUE PRODUCE UN ÁCIDO MONOPRÓTICO.

- 1) En el archivo Excel, hoja de cálculo de ácido monoprótico, en la celda G3, reemplaza el valor  $K_a$  del ácido monoprótico formado por la reacción con agua del anión proveniente de la disociación de la sal.
- 2) Pegue las concentraciones correspondientes de la especie, encontradas en la solución del problema asignado por el profesor, en las celdas H23-I23.  $C_T$ , la concentración total, se calcula automáticamente en la celda G23 sumando estas concentraciones.
- 3) Copie los valores  $\alpha$ , la fracción molar de cada especie en función de los datos de pH, al pH de interés, de las celdas correspondientes (columnas C-D) en las celdas H29-I29.
- 4) La concentración de cada especie obtenida con Excel se encuentra (celdas H24-I24) usando  $[i] = \alpha_i \cdot C_T$  donde  $i$  es una especie dada.
- 5) Compruebe las diferencias porcentuales que se muestran en las celdas H25-I25. Las diferencias deben estar por debajo del 2% (valores absolutos), indicando a los estudiantes que el problema se resolvió correctamente. Si se encuentra una diferencia  $>2\%$ , verifique que se utilicen todas las cifras significativas en los cálculos o busque errores en la solución del problema.

#### Apéndice 2

Encuentre la solubilidad de  $Ba(IO_3)_2$  a pH 2.

1. Escriba las ecuaciones pertinentes para los equilibrios. Se deben considerar varios equilibrios:



2. La solubilidad es  $[Ba^{2+}]/2$
3. Escriba las ecuaciones pertinentes para los equilibrios. Se deben considerar varios equilibrios:

$$K_{ps} = [Ba^{2+}][IO_3^-]^2 = 1.7 \times 10^{-9} \quad (A2.1)$$

$$K_a = \frac{[IO_3^-][H_3O^+]}{[HIO_3]} = 0.17 \quad (A2.2)$$

4. Escriba la ecuación de balance de masa. Debido a que el precipitado es la fuente de todas las especies con  $IO_3$ :

$$2[Ba^{2+}] = [IO_3^-] + [HIO_3] \quad (A2.3)$$

5. No se conoce la composición del búfer, por lo que no se puede establecer una ecuación de balance de carga.
6. Hay tres incógnitas  $[Ba^{2+}]$ ,  $[IO_3^-]$ , y  $[HIO_3]$  y tres ecuaciones, por lo tanto, se puede encontrar una solución.
7. No se harán aproximaciones para simplificar los cálculos.
8. Reescriba las ecuaciones 1 y 2 y reemplace el valor de la concentración de iones de hidrógeno,  $1.0 \times 10^{-2} M$ , y las constantes:

$$[IO_3^-] = \sqrt{\frac{1.7 \times 10^{-9}}{[Ba^{2+}]}} = 4.12 \times 10^{-5} \sqrt{\frac{1}{[Ba^{2+}]}} \quad (A2.4)$$

$$[HIO_3] = \frac{1.0 \times 10^{-2} [IO_3^-]}{0.17} \quad (A2.5)$$

Reemplace (4) en (5):

$$\begin{aligned} [HIO_3] &= \frac{1.0 \times 10^{-2} \times 4.12 \times 10^{-5} \sqrt{\frac{1}{[Ba^{2+}]}}}{0.17} \\ &= 2.43 \times 10^{-6} \sqrt{\frac{1}{[Ba^{2+}]}} \end{aligned} \quad (A2.6)$$

Reemplace (4) y (6) en (3):

$$\begin{aligned} 2[Ba^{2+}] &= 4.12 \times 10^{-5} \sqrt{\frac{1}{[Ba^{2+}]}} + 2.43 \times 10^{-6} \sqrt{\frac{1}{[Ba^{2+}]}} \\ &= 4.36 \times 10^{-5} \sqrt{\frac{1}{[Ba^{2+}]}} \\ 4[Ba^{2+}]^2 &= \frac{1.91 \times 10^{-9}}{[Ba^{2+}]} \rightarrow [Ba^{2+}] = \text{solubilidad} \\ &= 7.81 \times 10^{-4} M \end{aligned} \quad (A2.7)$$

9. Calcule las concentraciones de  $[HIO_3]$  y  $[IO_3^-]$ .
10. Reemplace (7) en (4) y (6):

$$\begin{aligned} [IO_3^-] &= 4.12 \times 10^{-5} \sqrt{\frac{1}{[Ba^{2+}]}} \\ &= 4.12 \times 10^{-5} \sqrt{\frac{1}{7.81 \times 10^{-4}}} = 1.48 \times 10^{-3} M \end{aligned} \quad (A2.8)$$

$$\begin{aligned} [HIO_3] &= 2.43 \times 10^{-6} \sqrt{\frac{1}{[Ba^{2+}]}} \\ &= 2.43 \times 10^{-6} \sqrt{\frac{1}{7.81 \times 10^{-4}}} = 8.68 \times 10^{-5} M \end{aligned} \quad (9)$$

Reemplazando (8) y (9) en (3) se confirman los cálculos:

$$2[Ba^{2+}] = [IO_3^-] + [HIO_3] = 1.48 \times 10^{-3} + 8.68 \times 10^{-5} = 1.56 \times 10^{-3} M$$

$$[Ba^{2+}] = 7.81 \times 10^{-4} M$$

Este valor concuerda con el resultado de la ecuación 7. Estos resultados se verifican siguiendo el procedimiento especificado en el Apéndice 1C y el archivo Excel (hoja de cálculo de ácido monoprótico).