

Fórmulas y cálculos químicos: Estequiometría(3^oESO)

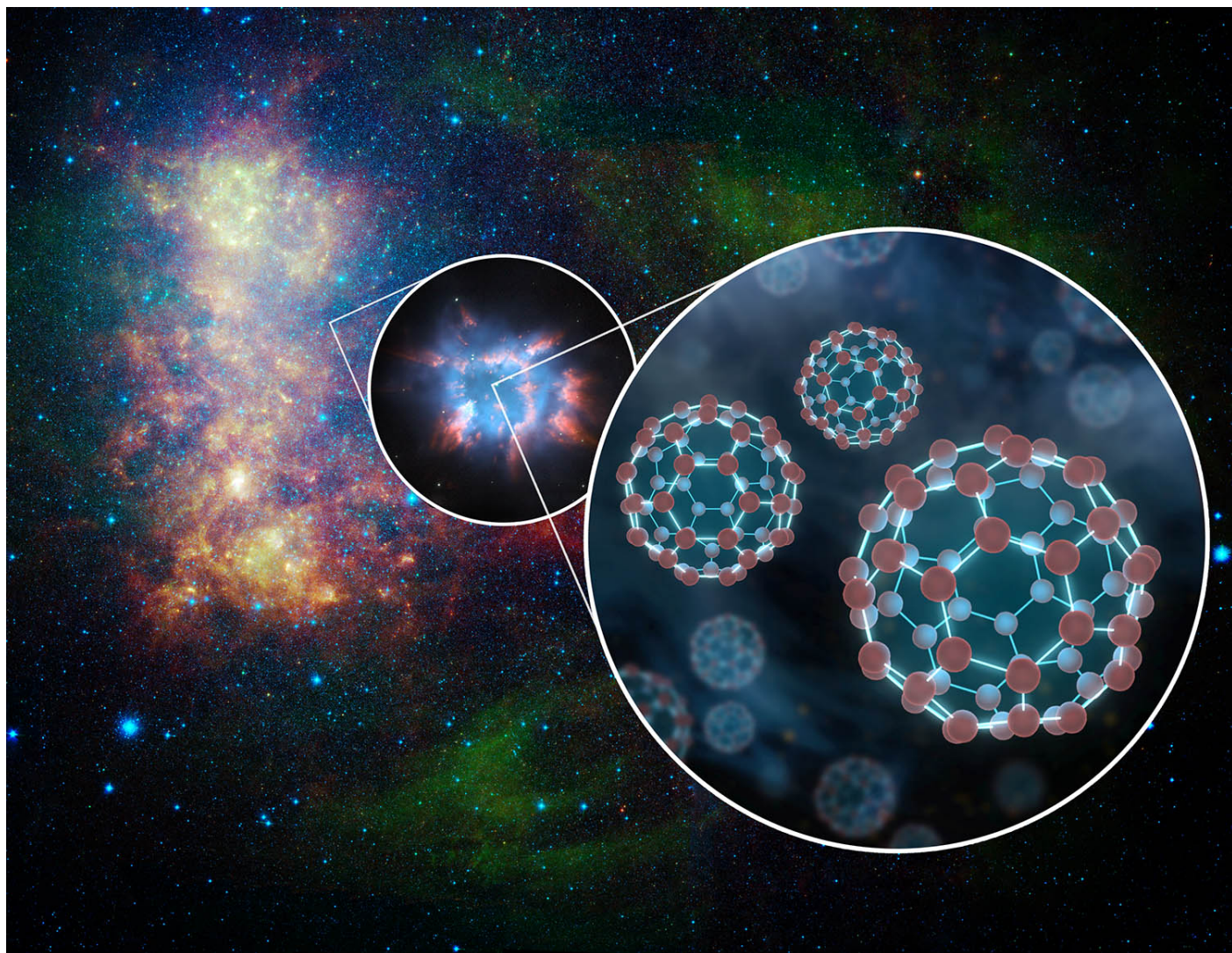
The Strange Doctor

Beyond all the Universes, love you, physics. . .

Multiverse of Madness

Resumen

Resumen con \LaTeX en español de algunas fórmulas y deducciones del tema de Química (3^oESO): reacciones, disoluciones y estequiometría.



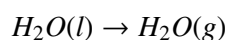
Índice

1. Reacciones químicas	3
1.1. Introducción a las reacciones químicas	3
1.2. Leyes de las reacciones químicas	3
1.3. Estequiometría y ecuaciones químicas	4
1.4. Tipos de reacciones principales	5
2. Moles y masa	6
3. Número de partículas y mol	7
4. Masa y partículas	7
5. Leyes de los gases ideales	7
6. Disoluciones	9

1. Reacciones químicas

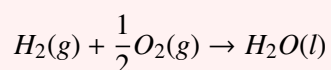
1.1. Introducción a las reacciones químicas

Como vimos en temas anteriores, se llama cambio físico a los cambios que se producen en las sustancias de forma que se altera su aspecto por no su composición o naturaleza. Ejemplo:

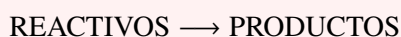


Reacción química

Se llama cambio químico o transformación química a los cambios que se producen en las sustancias que cambian su naturaleza. Equivalentemente, una reacción química es toda transformación de unas sustancias llamadas **reactivos**, en otras *diferentes* llamadas **productos**. Ejemplos:



Esquemáticamente, toda reacción es algo del tipo:



Las etapas de cualquier reacción química son generalmente:

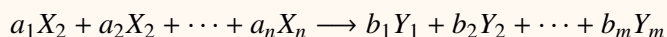
- Choques y colisiones entre átomos, moléculas e iones.
- Ruptura de los enlaces de los reactivos.
- Formación de los enlaces de los productos, en general a través de una sustancia intermedia denominada complejo activado o estado de transición.
- Finalización de la reacción cuando se agota el reactivo limitante o los choques dejan de ser efectivo o suficientemente energéticos para que la reacción tenga lugar.

1.2. Leyes de las reacciones químicas

Durante los siglos XVIII y XIX, se descubrieron las llamadas leyes ponderales (de masa y volumen) de las reacciones químicas. Una ley general para las transformaciones químicas fue concebida y descubierta o enunciada por Lavoisier.

Ley de conservación de la masa

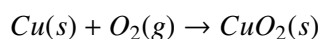
En toda reacción química, a temperaturas y energías convencionales, se conserva la masa. Esto es, la suma de la masa de todos los reactivos es exactamente igual a la suma de la masa de todos los productos, en una reacción química que sea totalmente efectiva y de sustancias puras. Matemáticamente, para la reacción general



se cumple, según Lavoisier, que

$$\sum_{i=1}^n m_i = \sum_{j=1}^m M_j \iff \sum m(\text{Reactivos}) = \sum M(\text{Productos}) \quad (1)$$

La teoría atómica, o cinético molecular, explica fácilmente la conservación de la masa. Ejemplo: Sea la reacción química del cobre sólido con el oxígeno



Si tengo 10 gramos de cobre y 12,52 gramos de CuO_2 , peróxido de cobre(II), ¿qué masa de oxígeno ha reaccionado? La solución es simple: 2.52 gramos.

1.3. Estequiometría y ecuaciones químicas

La Estequiometría es la parte de la Química que se ocupa del análisis de las reacciones químicas y los cálculos químicos. En particular, se ocupa de balancear las reacciones químicas y hacer cálculos con reactivos y productos. Se dice que una reacción o ecuación química está *balanceada* o *ajustada*, cuando el número de átomos o especies de cada tipo, y las cargas eléctricas si no fueran reacciones neutras (sin carga), son iguales en reactivos y productos. El proceso mediante el cual se logra que una reacción química esté ajustada, se llama ajuste o balance de una reacción química (ecuación química). Los números que preceden a cada compuesto, partícula, o ión en el proceso de ajuste se denominan **coeficientes estequiométricos**.

Una reacción química puede verse como cierto tipo de igualdad, o una representación simbólica de un proceso químico real, mediante los símbolos de los elementos, compuestos, y los números que indican cuántos átomos de cada elemento en el compuesto hay, y los coeficientes estequiométricos indicando el número de moléculas o unidades de cada entidad química fundamental que intervienen en la reacción química. Además, en una reacción química, se suele especificar también otras informaciones:

- El estado físico de cada sustancia, si ha lugar. Por ejemplo $Cu(s)$ indica cobre sólido, $H_2O(l)$ indica agua líquida, $O_2(g)$ oxígeno gaseoso y $HCl(aq.)$ ó $HCl(ac.)$ indican disolución acuosa.
- La energía necesaria para que se produzca la reacción química. Si la energía es absorbida $\Delta E > 0$ y se dice que la reacción es **endotérmica**. Si la energía es cedida o liberada, $\Delta E < 0$ y la reacción se dice que es **exotérmica**. La parte de la Química de reacciones que estudia los procesos de energía en las reacciones químicas se llama Termoquímica.

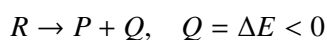
De nuevo, el procedimiento para igualar el número de átomos de cada tipo, en reactivos y productos, se llama ajuste. El ajuste se puede realizar por tanteo, o usando diversos procedimientos algebraicos o numéricos. De estos últimos, destaca el método de los coeficientes indeterminados, que no explicaré aquí. En general, en el proceso de ajuste por tanteo, se realizan los siguientes pasos:

1. Escribir la reacción química.
2. Analizar los reactivos y productos, contando el número de átomos de cada elemento que interviene en la reacción.
3. Añadir los coeficientes estequiométricos oportunos, por tanteo, delante de las fórmulas o especies químicas correspondientes para igualar el número de átomos. Suele preferirse multiplicar el resultado final por números de forma que los coeficientes estequiométricos sean números enteros, aunque en ocasiones se puede permitir el dejar coeficientes estequiométricos fraccionarios, no es lo más común esto último.
4. En casos difíciles, usar métodos numéricos o el procedimiento de los coeficientes indeterminados. Si una reacción no puede ajustarse, es que no es posible en la naturaleza.
5. Comprobación del resultado.

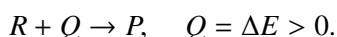
 0. Ajustar las siguientes reacciones químicas:

1. $Al(s) + HCl(l) \rightarrow AlCl_3(s) + H_2(g).$
2. $NH_3(g) + O_2(g) \rightarrow NO(g) + H_2O(g).$

Observación: para que una reacción química tenga lugar, ésta absorbe o libera energía, según el caso. En las reacciones exotérmicas:



y para las reacciones endotérmicas



Una reacción química ajustada o balanceada, que incluya además los estados físicos o de cada reactivo y producto, aporta una información crucial para el científico (químico, biólogo, físico, médico, ...). Esta información puede ser:

1. Las fórmulas de los reactivos y productos, por lo que se identifica la naturaleza de la reacción química. Eso incluye tipo de compuesto o elemento o partícula(ion), y su carga eléctrica (en general se trabaja con reacciones químicas neutras, pero son importantes también las reacciones de transferencia de carga eléctrica, o procesos de oxidación-reducción).
2. Número de átomos de cada elemento y especie química (partícula, ion) que interviene, así como su carga eléctrica.
3. Número de moles de cada sustancia que intervienen en reactivos y productos.
4. Volumen de reactivo y producto, en el caso de reacciones en las que intervienen gases. En reacciones gaseosas, se cumple la denominada *Ley de Avogadro*: “El mismo número de moles de gases diferentes, en las mismas condiciones de presión y temperatura, contienen el mismo número de partículas y tienen el mismo volumen”.
5. Masas de reactivos y productos que intervienen, en virtud de la ley de Lavoisier.

 1. Ajusta las siguientes reacciones químicas:

1. $C_3H_8(g) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g) + H_2O(l)$.
2. $Na(s) + H_2O(l) \rightarrow NaOH(aq.) + H_2(g)$.
3. $Fe(s) + O_2(g) \rightarrow Fe_2O_3(s)$.
4. $N_2(g) + H_2(g) \rightarrow NH_3(g)$.
5. $C_4H_{10}(g) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g) + H_2O(g)$.
6. $NO(g) + O_2(g) \rightarrow N_2O_5(g)$.
7. $Fe_2O_3(s) + C(s) \rightarrow Fe(s) + CO_2(g)$.

 2. Para las reacciones anteriores:

a) Calcular las masas molares de todos los compuestos presentes, y comprobar la ley de Lavoisier. Consulta la Tabla Periódica de tu libro o una en internet como www.ptable.com para hallar los valores de las masas molares atómicas y luego las masas moleculares molares.

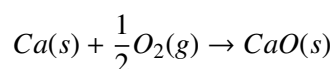
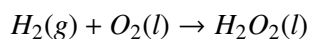
b) ¿Cuántos moles de átomos de cada elemento intervienen en las reacciones anteriores? ¿Cuántos átomos? ¿Cuántos moles de moléculas de cada sustancia intervienen? ¿Cuántas moléculas son?

Ayuda: para relacionar los moles con los gramos de cada sustancia hay unas expresiones que usan la masa molar, y para relacionar los moles con el número de moléculas, hay que saber el número o constante de Avogadro (ver secciones siguientes)

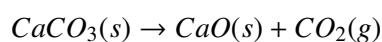
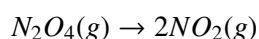
1.4. Tipos de reacciones principales

Hay una cantidad enorme de reacciones químicas posibles. Sin embargo, hay unas categorías o tipos de reacciones químicas particulares que son importantes en las aplicaciones o muy frecuentes en la Naturaleza, al menos a escalas de nuestro planeta, la Tierra. Son las siguientes:

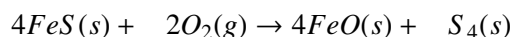
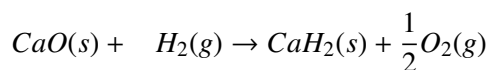
1. Reacción de **síntesis** o de **formación**. Son aquellas reacciones en las que hay solamente una sustancia en los productos. Ejemplos:



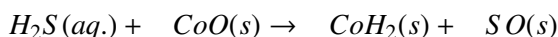
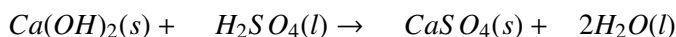
2. Reacción de **descomposición** o de **desintegración** o **disociación**. Son aquellas reacciones en las que solamente hay un reactivo, que da lugar a uno o varios productos. Ejemplos:



3. Reacción de **desplazamiento**. Aquella en la que se produce un cambio, y solo uno, de las partes o iones de reactivos entre sí. Ejemplo:

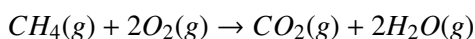
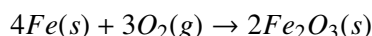
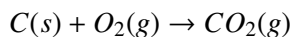


4. Reacción de **doble desplazamiento** o *metátesis*. Aquella en la que hay dos cambios en las partes de los iones de reactivos entre sí. Ejemplo:



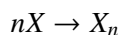
Un caso particular importante de las reacciones de doble desplazamiento son las que se producen por combinación de un ácido (sea hidrácido u oxoácido) con un hidróxido (llamado también base). Estas reacciones son llamadas reacciones *ácido-base*, y son importantes en Química, Física y la vida cotidiana (también en Bioquímica).

5. Reacciones de **combustión** (u oxidación). Son aquellas reacciones que tienen lugar con la reacción de una sustancia con el oxígeno. Algo + $O_2(g) \rightarrow$ Otra cosa. Ejemplos:



La reacción de combustión de un compuesto de carbono e hidrógeno (hidrocarburo), un hidroxcarburo (carbono, hidrógeno y oxígeno), produce generalmente dióxido de carbono y agua en general.

6. Reacciones de **polimerización**. Son aquellas reacciones que se forman por la adición o repetición de una unidad fundamental o *monómero*, en una unidad compuesta de varios llamada **polímero**:



Ejemplos: $2NO_2 \rightarrow (NO_2)_2 \rightarrow N_2O_4$, $nCH_2 \rightarrow (CH_2)_n$.

2. Moles y masa

Moles y masa molar

El número de moles (n) de una sustancia o especie química se calcular dividiendo la masa en gramos $m(s)$ entre la masa molar de dicha sustancia. Matemáticamente:

$$n = \frac{m(g)}{MM}$$

Uso: cuando me dan la masa en gramos y puedo calcular o me dan la masa molar de la sustancia.

Uso(II): cuando me dan los moles y la masa molar, puedo calcular los gramos, despejando

$$m(g) = n \cdot MM$$

3. Número de partículas y mol

Un mol, en el S.I., está relacionado con la constante de Avogadro

$$N_A \approx 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}.$$

Entonces, el número de partículas en una determinada cantidad de moles se puede calcular por proporcionalidad simple y directa:

Ecuaciones para el número de partículas y moles

El número N de partículas de una sustancia, que hay en una cantidad de moles dada n , se calcula mediante la expresión

$$N = n \cdot N_A$$

Uso: Calcular el número de partículas (átomos, moléculas, iones,...) en una determinada cantidad de moles.

Uso(II): Calcular el número de moles si se una determinada cantidad de partículas, despejando

$$n = \frac{N}{N_A}$$

4. Masa y partículas

Combinando los casos anteriores, podemos calcular la masa de un determinado número de partículas porque igualando

$$\frac{N}{N_A} = \frac{m(g)}{MM}$$

Por tanto, tendremos que

Masa y número de partículas

Para calcular la masa de un determinado número de partículas N , sabiendo la masa molar y el valor de la constante o número de Avogadro N_A , se usa la expresión:

$$m(g) = \frac{N}{N_A} \cdot MM$$

5. Leyes de los gases ideales

Para un gas igual o perfecto, las leyes de los gases ideales de Boyle-Mariotte, Gay-Lussac, Charles, Avogadro y combinada (general) de Clapeyron pueden sintetizarse en una simple ecuación de estado denominada ecuación del gas ideal, que tiene la forma siguiente.

Ecuación de estado del gas ideal

Para todo gas ideal o perfecto, se cumple la ecuación

$$PV = nRT$$

donde P es la presión, V es el volumen, n es el número de moles, T es la temperatura absoluta en kelvin y R es la constante de los gases ideales.

Uso: Hallar el volumen conocida la presión P , la temperatura T , y los moles n , o bien calcular cualquiera de las 4 variables (P, V, n, T), conocidas 3 de ellas.

Generalmente, P se da en atmósferas (atm), V en litros, y T en kelvin, por lo que la constante de los gases en estas unidades es

$$R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

En unidades del S.I.:

$$R = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Comentario: la constante R está relacionada con el número de Avogadro y la constante de Boltzmann de la teoría cinética y termodinámica estadística mediante la relación

$$R = k_B \cdot N_A$$

Recuerda: $1 \text{ atm} = 760 \text{ mmHg} = 1013 \text{ mb} = 101300 \text{ Pa} = 1013 \text{ hPa}$.

Recuerda(II): $T(\text{K}) = T(^{\circ}\text{C}) + 273$.

Recuerda(III): $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$.

Recuerda(IV): $1u = 1 \text{ g/mol}$ es la antigua unidad de masa atómica, también llamada dalton, con símbolo, Da . Usando el número de Avogadro, se puede probar que

$$1u \approx 1,66 \cdot 10^{-24} \text{ g} = \frac{1 \text{ g}}{\text{mol}} \frac{1 \text{ mol}}{6,022 \cdot 10^{23}} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = \frac{1}{12} m(^{12}\text{C}) = 1 \text{ Da}$$

Mnemotecnia: PaVo=RaTón. O también, frases como

Pues Vale, no Recuerdo Todo

Poderes Valiosos (Venusianos) no Requieren Telequinesis (Teletransportación)

o cualquier otra que produzca vuestra imaginación.

Mnemotecnia(II): un mol de gas ideal o perfecto en condiciones normales (c.n.), está a presión $P = 1 \text{ atm}$. y temperatura $T = 0^{\circ}\text{C} = 273 \text{ K}$. Usando la ecuación de estado del gas ideal $PV = nRT$ se deduce que un mol de cualquier gas ideal en c.n. ocupa $22,396 \text{ L} \approx 22,4 \text{ L}$. Similarmente, un mol de gas ideal o perfecto en condiciones estándar (c.e.), está a presión $P = 1 \text{ atm}$. y temperatura $T = 25^{\circ}\text{C} = 298 \text{ K}$. Un mol de cualquier gas ideal en c.e. ocupa aproximadamente $24,4 \text{ L}$ de volumen. En condiciones que no sean normales o estándar, se usa la ecuación del gas ideal, aunque también puede usarse en cualesquiera circunstancia, siempre que sea un gas ideal. Existen gases que no cumplen la ecuación de los gases ideales o perfecto. Por ejemplo, los gases reales siguen la ecuación de Van der Waals

$$\left(P + \frac{an^2}{V^2} \right) (V - nb) = nRT$$

y algunos fluidos exóticos pueden satisfacer la ecuación del gas de Chaplygin

$$P = -\frac{A}{\rho^\alpha}$$

6. Disoluciones

Las disoluciones son mezclas homogéneas con un soluto y disolvente. La concentración es la medida de cuánto soluto hay en la disolución. Hay varias formas de medir la concentración

Gramos por litro

Si simplemente dividimos la masa en gramos de soluto M_s entre el volumen en litros de disolución V , tenemos la concentración de una disolución en g/L (ó g/mL u otras unidades)

$$C(g/L) = \frac{\text{Masa en gramos de soluto}}{\text{Volumen en litros de disolución}} = \frac{M_s(g)}{V(L)}$$

Porcentaje en masa y volumen

Si conocemos la masa de soluto y disolvente M_s, M_d , o el volumen de soluto y disolvente V_s, V_d , conocemos la masa total y el volumen total de disolución $m = M_s + M_d$, y $V = V_s + V_d$. Entonces definimos la concentración en porcentaje de masa y volumen como sigue:

$$C(\%, m) = \frac{M_s}{m} \cdot 100 = \frac{\text{Masa de soluto}}{\text{Masa de disolución}} \cdot 100$$

y donde la masa de soluto y disolvente está en las mismas unidades, generalmente en gramos en Química.

$$C(\%, V) = \frac{V_s}{V} \cdot 100 = \frac{\text{Volumen de soluto}}{\text{Volumen de disolución}} \cdot 100$$

Molaridad y molalidad

En Química, es frecuente trabajar con moles, por lo que hay varias formas de dar la concentración con moles. La más frecuente es la molaridad M que mide los moles por litro (partido por litro, L) de disolución $M = mol/L$:

$$M = \frac{\text{Moles de soluto}}{\text{Volumen de disolución en litros}} = \frac{n_s}{V_d(L)}$$

La otra medida de concentración molar es la llamada molalidad m (no confundir con masa), que mide los moles por kilogramo de disolvente $m = mol/kg$:

$$m = \frac{\text{Moles de soluto}}{\text{Masa en kg de disolvente}} = \frac{n_s}{M_d(kg)}$$

Finalmente, hay otra medida de concentración de disoluciones, llamada fracción molar

Fracción molar

La fracción molar X_i (sin unidades) de una especie química o compuesto/sustancia i es igual al número de moles de la sustancia i (n_i) entre el número de moles totales n_t :

$$X_i = \frac{n_i}{n_t}$$

Si solamente hay un soluto y un disolvente, las fracciones molares de soluto X_s y disolvente X_d satisfacen las ecuaciones:

$$X_s = \frac{n_s}{n_t}$$

$$X_d = \frac{n_d}{n_t}$$

$$n_t = n_s + n_d$$

$$X_s + X_d = 1$$

¿Cuándo se usan unas formas de concentración y cuándo otras? Depende del contexto y la situación. En industria alimentaria, y otras áreas, se prefiere los tantos por ciento en masa y volumen o el g/L (ó g/mL). En Química, es más habitual usar la molaridad y la fracción molar, en menor medida la molalidad.

Recuerda: no confundir concentración con densidad. La densidad mide la masa total (no solamente la de soluto) en un volumen

$$d = \frac{m}{V}$$

La densidad se mide en $kg \cdot m^{-3}$ o en g/cm^3 (g/c.c.) habitualmente.

Ejemplo 1. Cálculos químicos. Calculando masas molares de moléculas. Para hallar la masa molar MM en $g/mol = g \cdot mol^{-1}$ de cualquier sustancia, hay que sumar la masa atómica de todos los átomos presentes en la sustancia. Generalmente, $1g/mol$ es equivalente a la antigua unidad llamada u , unidad de masa atómica. Hallar la masa molar del H_2 , H_2O , CO_2 , S_4 , SO_2 , SO_3 , $NaOH$, $Ca(OH)_2$, $Ca_3(PO_4)_2$, si las masas atómicas de los átomos necesarios son, en g/mol , $H = 1$, $O = 16$, $S = 32$, $C = 12$, $Na = 23$, $Ca = 40$, $P = 31$. Solución:

$$H_2: 2M(H) = 2g/mol.$$

$$H_2O = 2MM(H) + 1MM(O) = 18g/mol.$$

$$CO_2 = MM(C) + 2MM(O) = 12 + 32 = 44g/mol.$$

$$S_4 = 4MM(S) = 128g/mol.$$

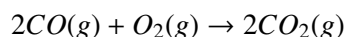
$$SO_2 = 2MM(O) + 1MM(S) = 32 + 64 = 96g/mol.$$

$$SO_3 = 32 + 3(16) = 32 + 48 = 80g/mol. NaOH = 23 + 16 + 1 = 40g/mol.$$

$$Ca(OH)_2 = 40 + 2(MM(O) + MM(H)) = 40 + 2(17) = 74g/mol.$$

$$MM(Ca_3(PO_4)_2) = 3(40) + 2(31 + 64) = 120 + 2(95) = 120 + 190 = 310g/mol.$$

Ejemplo 2. Sea la reacción ajustada:



a) Calcula la masa molar de los reactivos y productos:

$$\text{Solución: } CO = 28g/mol, O_2 = 32g/mol, CO_2 = 44g/mol.$$

b) Comprueba la ley de Lavoisier para la reacción ajustada.

c) Si la reacción tiene lugar en c.n., ¿qué cantidad de oxígeno en moles, gramos, y litros se necesitan para reaccionar completamente con 56 gramos de CO? ¿Cuántos moles, gramos y litros de dióxido se producen?

d) ¿Cuántas moléculas y átomos de cada tipo son las cantidades halladas en c) en c.n.? ¿Cambiarían en c.n.? Solución:


$$56g \frac{1mol CO}{28g} = 2mol CO$$

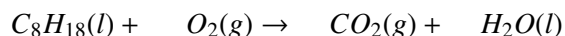
$$2\text{mol CO} \frac{1\text{mol O}_2}{2\text{mol CO}} = 1\text{mol O}_2$$

Como estamos en c.n., 1 mol de O_2 son 22.4L, y 2 mol de CO son 44.8L. Se producirán 2 moles de dióxido, 44.8L también. En condiciones estándar, no cambian los moles ni la masa, pero sí el volumen, ...Se obtendrían 24.4 L de O_2 , y se tienen el doble de litros de CO, CO_2 , es decir, 48.8L. En términos de masa, 2 moles de CO_2 son $44 \times 2 = 88$ gramos. 1 mol de oxígeno son 32 gramos. En cuanto a las partículas, habría que usar la fórmula $N = nN_A$, para las moléculas, y multiplicar por el número de átomos de cada uno, en cada caso. Así, se obtienen: 2 mol de CO o de CO_2 son $2N_A = 1,2 \cdot 10^{24}$ moléculas.


1 mol de O_2 son $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$ moléculas.

En total habrá 2 moles de átomos de carbono, y 3 moles de átomos de oxígeno en total, que multiplicado por el número de Avogadro darán el número de partículas de los mismos.

 3. Para la reacción de combustión del octano:



- Ajusta la reacción y calcula las masas molares de reactivos y productos.
- ¿Qué cantidad de octano reaccionará exacta y completamente con 89.6 L de oxígeno? ¿Qué cantidades de dióxido de carbono y agua se obtienen en c.n.? ¿Y en c.e.? ¿Y a $P = 1,5\text{atm}$ y $T = 300\text{K}$?
- Halla el número de moléculas y átomos de cada tipo en b).

 4. Una compañía sintetiza el ALON o aluminio transparente (compuesto anticipado por la película Star Trek(IV): the voyage home), mediante la reacción:



- Ajusta la reacción y calcula la masa molar del aluminio transparente (único producto de la reacción). Datos: $Al = 27\text{g/mol}$, $O = 16\text{g/mol}$, $N = 14\text{g/mol}$.
- Determina los gramos de aluminio necesarios, y el volumen en c.e. de oxígeno y nitrógeno necesarios, para producir una tonelada de aluminio transparente $Al_{23}O_{27}N_5$.
- ¿Cuántos moles de átomos hay de cada tipo en 1 tonelada de aluminio transparente?

Doctor Who?

ϺΔΞΘΣΠΧΚΙΟ

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\heartsuit\heartsuit\rangle + |\spadesuit\spadesuit\rangle) \quad \oint_{\partial\Sigma} \Theta = \int_{\Sigma} d\Theta$$

