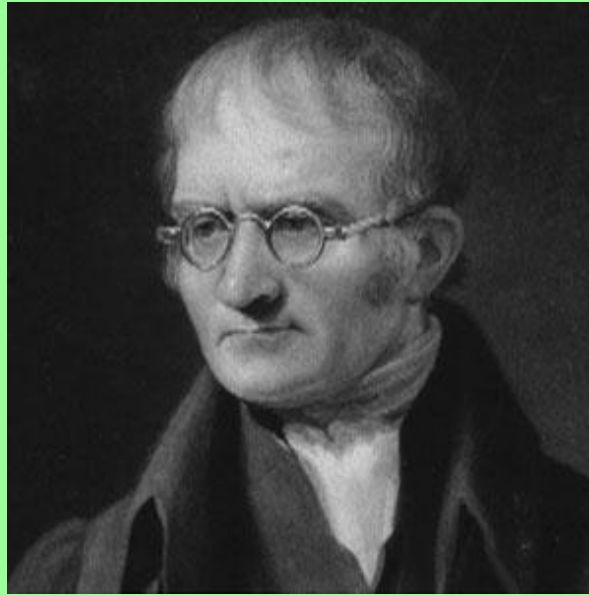


BLOQUE 1

CÁLCULOS NUMÉRICOS ELEMENTALES EN QUÍMICA



Amedeo Avogadro
(1776-1856)



John Dalton
(1766-1844)



Joseph Gay-Lussac
(1778-1850)

Clasificación de la materia

La materia puede clasificarse en dos categorías principales:

"**Sustancias puras**, cada una de las cuales tiene una composición fija y un único conjunto de propiedades.

"**Mezclas**, compuestas de dos o más sustancias puras.

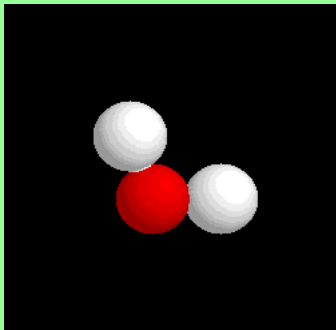
Las sustancias puras pueden ser **elementos** o **compuestos**, mientras que las mezclas pueden ser **homogéneas** o **heterogéneas**:



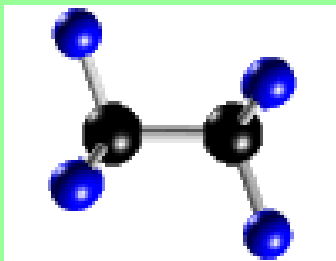
"Elementos: Son sustancias puras que no pueden descomponerse en otras sustancias puras más sencillas por ningún procedimiento. *Ejemplo: Todos los elementos de la tabla periódica: Oxígeno, hierro, carbono, sodio, cloro, cobre, etc.* Se representan mediante su **símbolo químico** y se conocen 115 en la actualidad.

"Compuestos: Son sustancias puras que están constituidas por 2 ó más elementos combinados en proporciones fijas. Los compuestos se pueden descomponer mediante procedimientos químicos en los elementos que los constituyen. *Ejemplo: Agua, de fórmula H_2O , está constituida por los elementos hidrógeno (H) y oxígeno (O) y se puede descomponer en ellos mediante la acción de una corriente eléctrica (electrólisis).*

Los compuestos se representan mediante **fórmulas químicas** en las que se especifican los elementos que forman el compuesto y el número de átomos de cada uno de ellos que compone la molécula. *Ejemplo: En el agua hay 2 átomos del elemento hidrógeno y 1 átomo del elemento oxígeno formando la molécula H_2O*



Molécula de agua (H_2O), formada por 2 átomos de hidrógeno (blancos) y 1 átomo de oxígeno (rojo)



Molécula de etano (C_2H_6), formada por 2 átomos de carbono (negros) y 6 átomos de hidrógeno (azul)

<http://www.alonsoformula.com/>

Cuando una sustancia pura está formada por un solo tipo de elemento, se dice que es una **sustancia simple**. Esto ocurre cuando la molécula contiene varios átomos pero todos son del mismo elemento. *Ejemplo: Oxígeno gaseoso (O_2), ozono (O_3), etc. Están constituidas sus moléculas por varios átomos del elemento oxígeno.*



Mezclas homogéneas: También llamadas **Disoluciones**. Son mezclas en las que no se pueden distinguir sus componentes a simple vista. *Ejemplo: Disolución de sal en agua, el aire, una aleación de oro y cobre, etc.*

Mezclas heterogéneas: Son mezclas en las que se pueden distinguir a los componentes a simple vista. *Ejemplo: Agua con aceite, granito, arena en agua, etc.*

http://www.quimicaweb.net/grupo_trabajo_fyq3/tema3/index3.htm

http://concurso.cnice.mec.es/cnice2005/93_iniciacion_interactiva_materia/curso/materiales/clasif/clasifica1.htm

http://usuarios.multimania.es/billclinton/ciencia/clasific_materia.htm

Masa atómica

La masa atómica es la masa de un átomo en reposo, se expresa en unidades de masa, u , (se define como $1/12$ de la masa del átomo de carbono-12)

La unidad de masa atómica, u , equivale a $1,66 \cdot 10^{-27} \text{kg}$;

Si un elemento tiene varios isótopos, el valor que se toma como masa atómica es el promedio de las masas de los isótopos según su abundancia en la naturaleza.

Masa molecular

La masa molecular es la suma de las masas de los átomos que forman la molécula, se expresa en u.

Mol

Es la cantidad de sustancia que contiene el mismo número de unidades elementales (átomos, moléculas, iones, etc.) que el número de átomos presentes en 12 g de carbono 12.

Este número de unidades elementales fue determinado experimentalmente, es el llamado **número de Avogadro**,
 $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$

Para cada sustancia química un mol es un número de gramos igual a su masa atómica o molecular

Masa molar

La **masa molar**, M , de una sustancia es la masa en gramos de un mol de **esa sustancia**. Se expresa en g/mol.

Formula empírica

Indica la relación mas sencilla que existe entre los átomos que forman el compuesto.

Puede darse el caso de que no exista una molécula que corresponda a esa formula.

Por ejemplo la formula empírica de un compuesto puede ser CH_2 , compuesto que no existe, pero que puede pertenecer a cualquier hidrocarburo de formula C_nH_{2n} es decir con un doble enlace.

Formula molecular

Expresa la relación real que existe entre los átomos que forman la molécula.

Las formulas C_2H_4 , C_3H_6 etc. son formulas moleculares que corresponden a la empírica CH_2

Composición centesimal de un compuesto

A partir de la fórmula de un compuesto se puede calcular el tanto por cien, en masa, de cada uno de los elementos que lo forman, estableciéndose así su composición centesimal.

Ejemplo: Calcular la composición centesimal del CaSO_4

a) Cálculo de la masa molar del CaSO_4

$$M(\text{CaSO}_4) = 40 + 32 + 4 \cdot 16 = 120 \text{ g/mol}$$

b) Cálculo de los porcentajes de los elementos que forman el compuesto.

$$\% \text{ de Ca} = (40 / 120) \cdot 100 = 33,3 \%$$

$$\% \text{ de S} = (32/120) \cdot 100 = 26,6\%$$

$$\% \text{ de O} = (64/120) \cdot 100 = 40\%$$

Fórmula empírica de una sustancia

A partir de la composición centesimal de una sustancia puede conocerse su fórmula empírica.

El procedimiento a seguir es:

- a) Cálculo del número de moles de átomos de cada elemento a partir de 100 g de muestra.
- b) Cálculo del número de moles relativos de cada elemento, para ello se toma como referencia el elemento de menor número de moles, los valores obtenidos corresponden a las relaciones entre los átomos, que se redondean a números enteros.

Ejemplo:

El análisis de un compuesto químico dio la siguiente composición: 26,57% de K, 35,36% de Cr y 38,07% de O.
Determinar su fórmula empírica.

- a) Cálculo del número de moles de cada elemento

$$n_K = 26,57 / 39 = 0,681 \text{ moles}; \quad n_{Cr} = 35,36 / 52 = 0,68 \text{ moles}$$

$$n_O = 38,07 / 16 = 2,379 \text{ moles}$$

- b) Cálculo de número de moles de átomos relativos

$$n_K / n_{Cr} = 0,68 / 0,68 = 1; \quad n_{Cr} / n_{Cr} = 1; \quad n_O / n_{Cr} = 2,379 / 0,68 = 3,5$$

Como la fórmula no puede expresarse con números decimales, para conseguir que sean todos enteros la multiplicamos por dos así se obtienen la fórmula más sencilla, que es la fórmula empírica.

La fórmula empírica será: $K_2Cr_2O_7$

Para poder saber la fórmula molecular es necesario tener el dato de la masa molecular real.

<http://encina.pntic.mec.es/~jsaf0002/p43.htm>

La reacción química

Es un proceso en el que una o más sustancias, denominadas **reactivos**, se transforman en otra u otras sustancias de propiedades totalmente diferentes, denominadas **productos**.

En toda reacción química se cumplen una serie de leyes ponderales y volumétricas.

<http://nuestrodiariodeclase.wikispaces.com/Grupo2>

<http://eca-cienciasnaturales.blogspot.com/2009/06/las-reacciones-quimicas.html>

Formulas químicas

Los compuestos químicos se representan como sabemos mediante formulas que nos indican la proporción en que están presentes cada uno de sus átomos, tanto en número como en cantidad de sustancia de cada uno de ellos.

Se denomina **estequiometría** al estudio de las relaciones entre los elementos que forman un compuesto o, al de las relaciones entre los reactivos y los productos de una reacción.

Ejemplo: El compuesto ácido nítrico se representa mediante la formula, HNO_3 , e indica las siguientes relaciones estequiométricas:

1 molécula de HNO_3 \longrightarrow 1 átomo de H \longrightarrow 1 átomo de N \longrightarrow 3 átomos de O

N moléculas de HNO_3 \longrightarrow N átomos de H \longrightarrow N átomos de N \longrightarrow 3N átomos de O

63 g de HNO_3 \longrightarrow 1 g de H \longrightarrow 14 g de N \longrightarrow 48 g de O

1 mol de molec. de HNO_3 \longrightarrow 1 mol de átomos de H \longrightarrow 1 mol de átomos de N \longrightarrow 3 moles de átomos de O

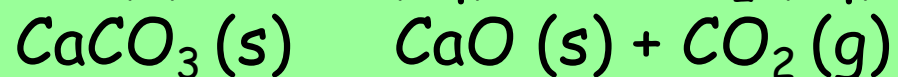
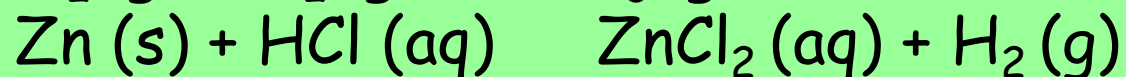
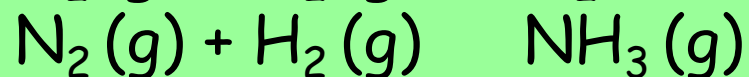
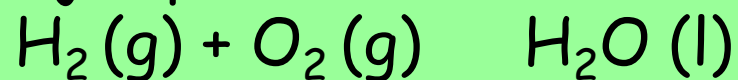
Representación de una reacción química

Las reacciones químicas se representan de forma simplificada mediante **ecuaciones químicas**. Se escriben las fórmulas de los reactivos en el primer miembro de la ecuación y las formulas de los productos en el segundo miembro, para separar ambos miembros se usa una flecha que indica el sentido en que transcurre la reacción.

A veces se indica el estado de las sustancias, solido líquido o gaseoso.

http://www.iesbanaderos.org/html/departamentos/fisyquim/apuntes/TEMA_6_%20Reacciones_Quimicas.htm

Ejemplos:



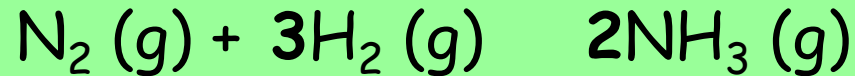
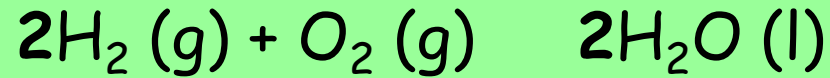
Todas las reacciones anteriores cumplen la ley de conservación de la masa por lo que debe haber el mismo número de átomos en los reactivos que en los productos, esto nos obliga a **ajustar la reacción** siempre que lo anterior no ocurra.

Para ajustar una reacción deben colocarse delante de cada fórmula coeficientes numéricos que afecten a toda ella y de tal manera que el número de átomos de cada elemento sean el mismo en los reactivos que en los productos. Estos coeficientes se llaman **estequiométricos**.

Las reacciones químicas sencillas pueden ajustarse por:

"Tanteo

Las reacciones químicas anteriores ajustadas serían:



" Por el método de los coeficientes

Consiste en asignar un coeficiente a cada reactivo y a cada producto y plantar un sistema de ecuaciones, llamado sistema de **ecuaciones diofánticas**

Ejemplo:

$a \text{C}_8\text{H}_{18} + b \text{O}_2 \quad c \text{CO}_2 + d \text{H}_2\text{O}$ asignamos los coeficientes

Igualando el número de átomos de cada elemento en reactivos y productos, resulta.

Carbono: $8.a = 1.c$

Hidrógeno: $18.a = 2.d$

Oxígeno: $2.b = 2.c + 1.d$

El número de incógnitas es mayor que el de ecuaciones

Para resolverlo damos un valor arbitrario a una de ellas
Si damos $a = 1$, las ecuaciones quedan de la forma.

Carbono: $8.1 = 1.c$

$$c = 8$$

Hidrógeno: $18.1 = 2.d$

$$d = 18/2 = 9$$

Oxígeno: $2.b = 2.c + 1.d$

$$2b = 2.8 + 1.9 = 25$$

$$b = 25 / 2$$

Así la ecuación igualada sería:



Si queremos evitar los coeficientes fraccionarios podemos reducir todos los coeficientes a común denominador y así eliminarlos.



http://www.youtube.com/watch?v=8onyx10UD18&feature=player_embedded#!

Disoluciones

Muchas de las reacciones químicas se realizan en disoluciones acuosas de sólidos de líquidos e incluso de gases.

Formas de expresar la composición de las disoluciones.

Indicar la composición de una disolución es decir la proporción en la que se encuentran los componentes de la misma, es dar su **concentración**.

- **Porcentaje en masa** Es la masa en gramos de soluto por cada 100 gramos de disolución.

$$\frac{m_{\text{solute}}}{m_{\text{disolución}}} = \frac{x}{100} \quad x = (m_s/m_d).100$$

Una disolución de sal en agua al 20% indica que hay 20 g de sal por cada 100 g de disolución.

- **Porcentaje en volumen.** Se utiliza en disoluciones de líquidos y de gases y es el volumen de soluto por cada 100 volúmenes de disolución.

Una disolución de HCl al 30% en volumen quiere decir que hay 30 ml de HCl (g) por ca 100 ml de disolución.

” **Masa de soluto en un volumen de disolución.** Es el número de gramos de soluto que hay en un litro de disolución.

Si decimos que la concentración de una disolución de azúcar en agua es de 15 g / l es que contiene 15 g de azúcar por cada litro de disolución.

• **Concentración molar o molaridad.** Es el número de moles de soluto que contiene un litro de disolución.

$$M = n_s / V_d$$

Una disolución 0,5 M de NaOH significa que contiene 0,5 moles de NaOH por litro de disolución.

• **Fracción molar de cada componente.** Indica el número de moles de soluto o de disolvente respecto al número total de moles.

$$X_s = n_s / n_s + n_d \quad ; \quad X_d = n_d / n_s + n_d$$

<http://barbaraprobostesalazar.blogspot.com/>

<http://www.youtube.com/watch?v=9vGiNmIeOuI>

Preparación de disoluciones.

Un aspecto muy importante en el trabajo del químico es la preparación de disoluciones para ello hay que considerar dos aspectos:

1) **Cálculos teóricos**, es decir cuánto soluto hay que disolver para preparar un determinado volumen de disolución.

2) **Realización práctica**. Protocolo que se debe seguir para preparar la disolución. Si se trata de solutos sólidos el procedimiento que mas se usa es el siguiente:

a) **Pesar la cantidad de soluto**. El calculado previamente.

b) **Colocar este soluto en un vaso de precipitados o en un erlenmeyer que contiene una pequeña cantidad de agua destilada** . De esta forma se realiza la disolución

- c) Verter la disolución en un matraz aforado que tenga por volumen el que corresponda al volumen que queramos preparar. Si en el vaso de precipitados quedasen restos de soluto se deben hacer uno o dos lavados con agua destilada y añadirlos al matraz aforado.
- d) Añadir agua destilada al matraz aforado. Debe de hacerse hasta que queden uno o dos centímetros por debajo del enrase.
- e) Completar con agua hasta el enrase ayudándonos de una pipeta. La pipeta se usa para conseguir un buen enrase y no pasarnos. El enrase estará bien cuando el menisco de la disolución sea tangente a la marca del matraz aforado.
- f) Etiquetar el matraz indicando el soluto y la concentración de la disolución preparada.

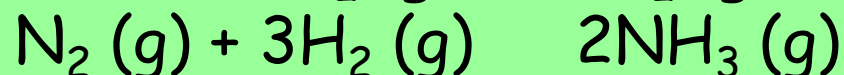
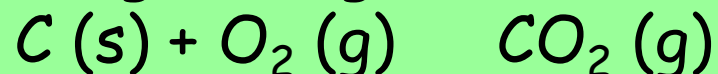
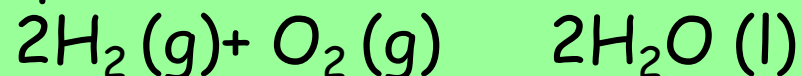
<http://alkimiaquimika.blogspot.com/2010/04/preparacion-de-soluciones.html>

Tipos de reacciones químicas

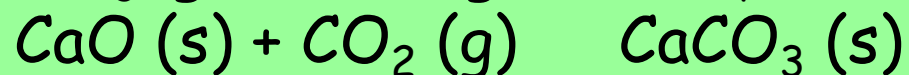
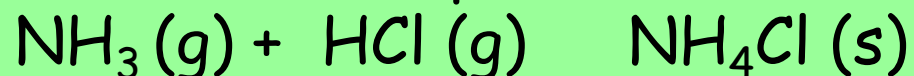
a. Reacciones de síntesis

Son aquellas en las que se obtiene una única sustancia a partir de otras más sencillas.

Todas las reacciones en las que se obtiene un compuesto a partir de sus elementos son de este tipo

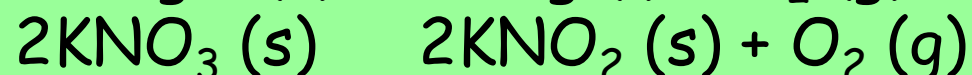
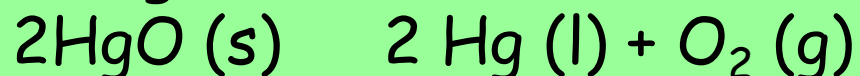


Pero también son de este tipo reacciones como:



b. Reacciones de descomposición

Son las contrarias a las de síntesis, es decir una sustancia da origen a otras más sencillas



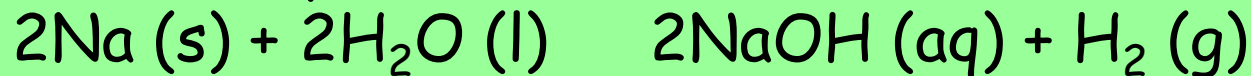
c. Reacciones de desplazamiento o de sustitución

Son aquellas en las que un elemento de uno de los reactivos desplaza o sustituye a otro elemento de otro reactivo.

La mayoría de las reacciones entre un metal y un ácido son de este tipo:



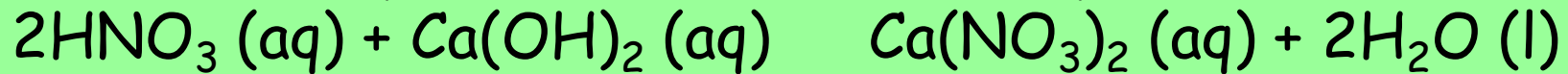
También otros tipos de reacciones como:



d. Reacciones de doble desplazamiento o doble sustitución.

Son aquellas en las que dos elementos se desplazan mutuamente

Las reacciones llamadas de ácido-base son de este tipo



Algunas de estas reacciones ocurren con **precipitación**, es decir con formación de un producto muy poco soluble que se deposita en el fondo del recipiente.



Cálculos en las reacciones químicas.

El procedimiento a seguir para hacer cálculos en las reacciones químicas podemos esquematizarlo en los siguientes pasos:

1. Escribir la ecuación química del proceso y ajustarla
2. Identificar los datos y expresarlos en moles. Identificar también las incógnitas.
3. Establecer las relaciones estequiométricas molares correspondientes a la ecuación química. Calcular el valor de las incógnitas en moles.

4. Expresar el resultado o resultados finales en las unidades que nos pida el problema.

Veamos su aplicación en un ejemplo: La plata reacciona con el ácido nítrico; en el proceso se forma nitrato de plata, que queda en disolución, e hidrógeno gas. Calcular la masa de nitrato de plata que se obtendrá al reaccionar una pepita de plata de 2,87 g de masa, con suficiente ácido.

1. Ecuación química y ajuste:

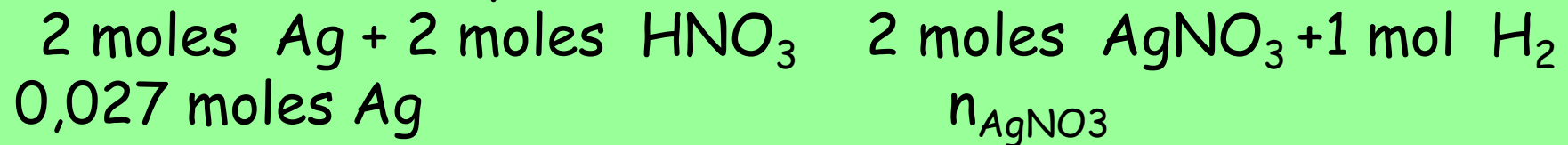


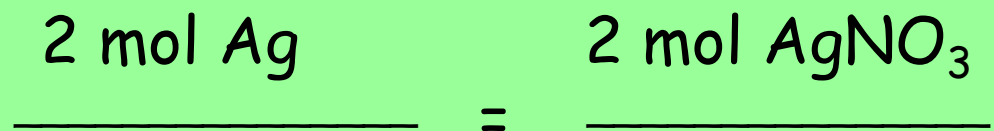
2. Datos: $m_{\text{Ag}} = 2,87 \text{ g}$ que lo pasamos a moles:

$$n_{\text{Ag}} = m_{\text{Ag}} / M_{\text{ag}} = 2,87 \text{ g} / 107,87 \text{ g/mol} = 0,027 \text{ moles}$$

Incógnitas: m_{AgNO_3}

3. Relaciones estequiométricas molares:





$$n_{\text{AgNO}_3} = 0,027 \text{ mol} \cdot 2 \text{ mol} / 2 \text{ mol} = 0,027 \text{ mol}$$

4. Expresión del resultado en g.

$$m_{\text{AgNO}_3} = n_{\text{AgNO}_3} \cdot M_{\text{AgNO}_3} = 0,027 \text{ mol} \cdot 156,87 \text{ g/mol} = 4,25 \text{ g}$$

<http://www.estuvideo.com/video/s3fd66gQl8E/Unidad-2-Estequiometría-Cálculos-con-reacción.html>

Reacciones entre gases

Cuando en una reacción química intervienen sustancias en fase gas, supondremos siempre que su comportamiento es el de los gases ideales, se cumple entonces la **ley general de los gases** $P \cdot V = n \cdot R \cdot T$ siendo R la constante universal de los gases que tiene por valor $R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} / \text{mol} \cdot \text{K}$
 $= 8,31 \text{ J} / \text{mol} \cdot \text{K}$

A partir de esta ecuación podemos calcular el volumen de un mol de sustancia para unas determinadas condiciones de P y T.

" Volumen molar de gases

Es el volumen que ocupa un mol de un gas. Mientras en las sustancias sólidas y líquidas los volúmenes molares son característicos de cada sustancia, en los gases coinciden siempre que estos estén en las mismas condiciones de presión y temperatura.

Experimentalmente se observa que un mol de cualquier gas en CN de presión y temperatura (1 atm y 0 °C) ocupa un volumen de 22,4 litros, este volumen recibe el nombre de volumen molar normal.

" Relación entre la densidad de los gases y su masa molar

Si la ecuación de los gases $p.V = n.R.T$ la ponemos en la forma $p.V = m/M_m . R.T$ y ahora pasamos V al segundo miembro y M_m al primero, tendremos: $p.M_m = m/V .R.T$ y como $d = m/V$; despejando M_m : $M_m = d.R.T/p$

“ **Mezclas de gases.** - Si son varios los gases que están mezclados en un mismo recipiente, cada uno de ellos ocupa el volumen de todo el recipiente, es decir, el volumen de cada gas es el del recipiente, y además cada gas ejerce una presión sobre las paredes del recipiente llamada, **presión parcial**, esta presión es la que ejercería si se encontrase sólo a la misma temperatura que la mezcla de gases.

Dalton enunció en 1801 una ley que dice que la **presión total de una mezcla de gases es la suma de las presiones parciales:** $P_T = P_1 + P_2 + P_3 + \dots$

La ley general de los gases puede aplicarse también a una mezcla de gases y por tanto se pueden escribir las relaciones siguientes:

$P_1 \cdot V = n_1 \cdot R \cdot T$ aplicada a un gas 1 de la mezcla

$P_T \cdot V = n_T \cdot R \cdot T$ aplicada a la mezcla de todos

Si estas dos expresiones las dividimos miembro a miembro

Tendremos:

$$\frac{P_1}{P_T} = \frac{n_1}{n_T} \text{ y como } X_1 = n_1 / n_T; \text{ fracción molar del gas 1}$$

Podemos entonces decir que: $P_1 = P_T \cdot X_1$

La presión parcial de un gas, en una mezcla de gases, es igual a la presión total de la mezcla por su fracción molar.

Ejemplos de aplicación

1.- Un recipiente de 4 litros contiene nitrógeno a 25 °C y 604 torr, y otro recipiente, de 10 litros, contiene helio a 25 °C y 354 torr. Se mezclan ambos gases conectando los dos recipientes mediante un tubo de volumen despreciable. Calcula:

a) Las presiones parciales de cada gas y la presión total de la mezcla.

- b) Las fracciones molares de ambos gases en la mezcla
 c) La composición de la mezcla en tanto por ciento en masa.

a) Calculo de la presiones parciales de N_2 y He en la mezcla:
 Calculamos primero los moles de cada uno de los gases:

Moles de N_2 $P_{N_2} \cdot V = n_{N_2} R \cdot T ;$
 $604 \text{ torr} / 760 \text{ torr} \cdot \text{atm}^{-1} \cdot 4L = n_{N_2} \cdot 0,082 \text{ atm.L} / \text{mol.K} \cdot$
 298 K

$$n_{N_2} = 604 / 760 \text{ atm}^{-1} \cdot 10 \text{ L} / 0,082 \text{ atm.L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot 298$$

$$n_{N_2} = 0,13 \text{ mol}$$

Moles de He $P_{he} \cdot V = n_{He} \cdot R \cdot T$
 $354 \text{ torr} / 760 \text{ torr} \cdot \text{atm}^{-1} \cdot 10 = n_{He} \cdot 0,082 \text{ atm.L} / \text{mol.K} \cdot$
 298 K

$$n_{He} = 0,019 \text{ mol}$$

Presión parcial de N_2 en la mezcla

$$P_{N_2} \cdot V_T = n_{N_2} \cdot R \cdot T ;$$

$$P_{N_2} = 0,13 \text{ mol} \cdot 0,082 \text{ atm.L} / \text{mol.K} \cdot 298 \text{ K} / 14 \text{ L} = 0,227 \text{ atm.}$$

Presión parcial de He en la mezcla:

$$P_{\text{He}} = 0,019 \text{ mol} \cdot 0,082 \text{ atm L/K.mol} \cdot 298 \text{ K} / 14 \text{ L} = 0,033 \text{ atm.}$$

Presión total: $P_T = P_{\text{N}_2} + P_{\text{He}} = 0,227 + 0,033 = 0,260 \text{ atm.}$

b) Calculo de las fracciones molares de N₂ y He en la mezcla

$$X_{\text{N}_2} = n_{\text{N}_2} / n_T = 0,13 / 0,13 + 0,019 = 0,13 / 0,149 = 0,87$$

$$X_{\text{He}} = 1 - 0,87 = 0,13$$

c) % en masa

$$m_{\text{N}_2} = n_{\text{N}_2} \cdot M_{\text{N}_2} = 0,13 \text{ mol} \cdot 28 \text{ g/mol} = 3,64 \text{ g}$$

$$m_{\text{He}} = n_{\text{He}} \cdot M_{\text{he}} = 0,019 \text{ mol} \cdot 4 \text{ g/mol} = 0,076 \text{ g}$$

$$\frac{3,64 \text{ g de N}_2}{3,716 \text{ g total}} = \frac{x \text{ de N}_2}{100 \text{ g total}} ;$$

$$x_{\text{N}_2} = 3,64 \cdot 100 \text{ g} / 3,716 = 97,95\%;$$

$$x_{\text{He}} = 100 - 97,95 = 2,05\%$$

2.- El óxido de cobre (II) reacciona con amoníaco gas obteniéndose nitrógeno, vapor de agua y cobre metálico. Calcula: a) El volumen de nitrógeno medido en condiciones normales de presión y temperatura, que se desprende al reaccionar 50 g de óxido de cobre (II) con suficiente amoníaco.

b) El volumen de amoníaco necesario, medido en las mismas condiciones.

• Ecuación química: $\text{CuO(s)} + \text{NH}_3(\text{g}) \rightarrow \text{N}_2(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\text{g}) + \text{Cu(s)}$

• Ajuste: $3\text{CuO}(\text{s}) + 2\text{NH}_3(\text{g}) \rightarrow \text{N}_2(\text{g}) + 3\text{H}_2\text{O}(\text{g}) + 3\text{Cu}(\text{s})$

• $n_{\text{CuO}} = 50 \text{ g} / 79,54 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 0,63 \text{ moles}$

• **Calculo del volumen de nitrógeno desprendido en CN**

$$\frac{3 \text{ moles de CuO}}{1 \text{ mol de N}_2} = \frac{0,63 \text{ moles de CuO}}{n \text{ de N}_2}$$

$$n_{\text{N}_2} = 0,63 \text{ moles} / 3 = 0,21 \text{ moles}$$

$$V(\text{CN}) = 22,4 \text{ L} / \text{mol} \cdot 0,21 \text{ mol} = 4,704 \text{ L}$$

"Calculo del número de moles de NH₃ necesarios

3 mol de CuO

0,63 mol de CuO

$$\frac{3 \text{ mol de CuO}}{2 \text{ mol de NH}_3} = \frac{0,63 \text{ mol de CuO}}{x \text{ de NH}_3}$$

$$x = 2 \cdot 0,63 \text{ mol} / 3 = 0,42 \text{ moles}$$

•Calculo del volumen de NH₃

$$V \text{ (CN)} = 22,4 \text{ L} / \text{mol} \cdot 0,42 \text{ mol} = 9,408 \text{ L}$$

[http://www.gobiernodecanarias.org/educacion/3/Usrn/lentiscal/1-CDQuimica-TIC/FlashQ/0-](http://www.gobiernodecanarias.org/educacion/3/Usrn/lentiscal/1-CDQuimica-TIC/FlashQ/0-1Gases/Gases%20ideales/LeydeGasesideales.htm)

[1Gases/Gases%20ideales/LeydeGasesideales.htm](http://www.gobiernodecanarias.org/educacion/3/Usrn/lentiscal/1-CDQuimica-TIC/FlashQ/0-1Gases/Gases%20ideales/LeydeGasesideales.htm)

<http://www.educaplus.org/gases/gasideal.html>

<http://www.youtube.com/watch?v=yLFvmiN9rbs>

Reacciones en disolución

Un número elevado de reacciones químicas tienen lugar en disolución acuosa, por tanto tendremos que manejar en estos casos el concepto de concentración de disoluciones.

Veamos algún ejemplo de este tipo de reacciones.

•1.- El ácido clorhídrico reacciona con el hidróxido de bario dando cloruro de bario y agua. Calcula el volumen de ácido clorhídrico 0,4 M necesario para obtener 22,5 g de cloruro de bario.

• **Reacción:** $\text{HCl (aq)} + \text{Ba (OH)}_2 \text{ (s)} \rightarrow \text{BaCl}_2 \text{ (aq)} + \text{H}_2\text{O (l)}$

• **Ajuste:** $2\text{HCl (aq)} + \text{Ba (OH)}_2 \rightarrow \text{BaCl}_2 \text{ (aq)} + 2\text{H}_2\text{O (l)}$

• $n_{\text{BaCl}_2} = 22,5 \text{ g} / 208 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 0,108 \text{ mol}$

• **Calculo de n_{HCl}** $\frac{1 \text{ mol de HCl}}{1 \text{ mol de BaCl}_2} = \frac{x \text{ de HCl}}{0,108 \text{ mol de BaCl}_2}$

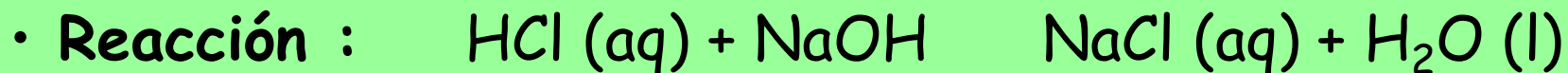
$$x_{\text{HCl}} = 0,108 \text{ moles}$$

- **Volumen de HCl (aq) 0,4 M necesario**

$$\frac{0,4 \text{ moles de HCl}}{1 \text{ L de disolución}} = \frac{0,108 \text{ mol de HCl}}{x \text{ disolución}}$$

$$X = 0,108 \text{ L} / 0,4 = 0,27 \text{ L}$$

2.- Calcula el volumen de ácido clorhídrico de un 36% de riqueza en ácido, y cuya densidad es 1,179 g/ ml, que se necesita para neutralizar 100 ml de una disolución de NaOH 0,5 M.



- **Ajuste :** Está ajustada

- $n_{\text{NaOH}} = 0,5 \text{ Moles} / \text{L} \cdot 0,1 \text{ L} = 0,05 \text{ moles}$

- $n_{\text{HCl}} \text{ necesarios} = 0,05 \text{ moles}$ pues la reacción es mol a mol.

• Molaridad de la disolución de HCl

Un litro de disolución tiene de masa

$$m = V \cdot d = 1000 \text{ ml} \cdot 1,179 \text{ g / ml} = 1179 \text{ g}$$

$$\frac{36 \text{ g de HCl}}{100 \text{ g disol.}} = \frac{m_{\text{HCl}}}{1179 \text{ g disol.}}$$

$$m_{\text{HCl}} = 36 \text{ g} \cdot 1179 \text{ g} / 100 \text{ g} = 424,44 \text{ g}$$

El número de moles / L de la disolución es

$$424,44 \text{ g} / 36,5 \text{ g} \cdot \text{Mol}^{-1} = 11,63 \text{ M}$$

El volumen necesario de disolución será el que contenga
Los 0,05 moles que reaccionan.

$$V_{\text{HCl (aq)}} = 0,05 \text{ moles} / 11,63 \text{ moles} \cdot \text{L}^{-1} = 0,0043 \text{ L} = 4,3 \text{ ml}$$

Cálculos con reactivo limitante.

En muchas reacciones químicas uno de los reactivos se pone en exceso en el proceso, esto hace que las cantidades iniciales de los reactivos no cumplan las proporciones estequiométricas que establece su ecuación química ajustada.

Cuando esto ocurre, el otro reactivo se consume por completo, y es con el que debemos hacer los cálculos estequiométricos.

Se denomina reactivo limitante al que se consume en su totalidad y, por tanto, limita la cantidad de productos que se forman.

Es necesario saber, antes de realizar ningún cálculo, quién es el reactivo limitante.

Veamos en un ejemplo como se determina y como se resuelve después el problema.

1.- El Carbono reacciona con el hidrógeno para formar metano. Si se mezclan 100 g de carbono y 30 g de hidrógeno.

a) Indica cuál es el reactivo limitante.

b) Calcula la masa de metano que podemos obtener.

“ **Reacción** : $C(s) + H_2(g) \rightarrow CH_4(g)$

• **Ajuste** : $C(s) + 2H_2(g) \rightarrow CH_4(g)$

• $n_C = 100 \text{ g} / 12 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 8,33 \text{ moles}$

• $n_{H_2} = 30 \text{ g} / 2 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 15 \text{ moles}$

• **a) Reactivo limitante**

$$\frac{1 \text{ mol C}}{2 \text{ mol H}_2} = \frac{8,33 \text{ moles C}}{x_{H_2}}$$

$x_{H_2} = 2 \cdot 8,33 \text{ moles} = 16,66 \text{ moles}$ serían los moles que se necesitarían para que reaccionase todo el C. Pero como solo tenemos 15 moles es imposible que reaccione todo el C. **El reactivo limitante será el H₂**

Si hacemos la proporción con el H_2 tendremos:

$$\frac{1 \text{ mol de C}}{2 \text{ moles } H_2} = \frac{x_C}{15 \text{ moles } H_2}$$

$$x_C = 15 / 2 \text{ moles} = 7,5 \text{ moles}$$

Como tenemos 8,33 moles de C quedaran sin reaccionar
 $8,33 \text{ moles} - 7,5 = 0,83 \text{ moles}$.

b) Masa de metano que se obtiene:

Como por dos moles de H_2 se obtiene 1 mol de CH_4 por
15 moles de H_2 se debe obtener la mitad de CH_4 , es
decir, 7,5 moles

$$m_{CH_4} = 7,5 \text{ mol} \cdot M_{CH_4} = 7,5 \cdot 16 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 120 \text{ g}$$

<http://www.estuvideo.com/video/yqJlqKfXG6A/Reaccion-quimica-15-Reactivo-limitante.html>

Reacciones con reactivos impuros

Las materias primas que se utilizan en los procesos químicos no suelen estar en estado totalmente puro, por lo que se debe conocer la **pureza o riqueza** del mineral. Esta pureza se suele expresar en **tanto por cien en masa**.

Debemos entonces tener en cuenta este dato para saber exactamente la cantidad de reactivo que verdaderamente interviene en la reacción.

1.- El cinabrio es un mineral de color rojo que contiene sulfuro de mercurio (II). Si se calienta en presencia de oxígeno, se produce la reacción:



Calcula la pureza de 500 g de una muestra de cinabrio si produce 33 g de Hg.

• Reacción: $\text{HgS (s)} + \text{O}_2 \text{ (g)} \rightarrow \text{Hg (l)} + \text{SO}_2 \text{ (g)}$

• Cálculo de $n_{\text{Hg}} = 33 \text{ g} / 200,59 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 0,16 \text{ moles}$

• Como la reacción es mol a mol harán falta de HgS puro

$n_{\text{Hg}} = 0,16 \text{ moles}$

La masa correspondiente a estos 0,16 moles es:

$$m_{\text{HgS}} = 0,16 \text{ moles} \cdot M_{\text{HgS}} = 0,16 \text{ moles} \cdot 232,65 \text{ g} \cdot \text{Mol}^{-1}$$

$m_{\text{HgS}} = 37,22 \text{ g}$ es la cantidad que ha reaccionado

$$\cdot \text{Pureza} = (m_{\text{HgS}} / m_{\text{muestra}}) \cdot 100 = (37,22 \text{ g} / 500 \text{ g}) \cdot 100$$

$$\text{Pureza} = 7,44 \%$$

2.- El ácido clorhídrico reacciona con el carbonato de calcio dando cloruro de calcio, dióxido de carbono y agua. Calcula la cantidad de caliza, del 90% de riqueza en carbonato de calcio, que hay que hacer reaccionar con un exceso de ácido clorhídrico para obtener 1000 litros de dióxido de carbono, medidos en condiciones normales.

• Reacción ajustada



• Cálculo del número de moles de CO_2 obtenidos

$$n_{\text{CO}_2} = 1000 \text{ L} / 22,4 \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1} = 44,64 \text{ moles}$$

Según la estequiometría de la reacción con 1 mol de CaCO_3

Se obtiene también 1 mol de CO_2 , luego para obtener 44,64 moles de CO_2 se necesitarán también 44,64 moles de CaCO_3

- $m_{\text{CaCO}_3} = 44,64 \text{ moles} \cdot M_{\text{CaCO}_3} = 44,64 \text{ moles} \cdot 100 \text{ g/mol}$

$$m_{\text{CaCO}_3} = 4464 \text{ g} = 4,464 \text{ kg}$$

- Calculo de la cantidad de caliza que contiene un 90% de CaCO_3 puro

- $$\frac{90 \text{ g de CaCO}_3 \text{ puro}}{100 \text{ g de caliza}} = \frac{4464 \text{ g de CaCO}_3 \text{ puro}}{m_{\text{caliza}}}$$

$$m_{\text{caliza}} = 4464 \text{ g} \cdot 100 \text{ g} / 90 \text{ g} = 4960 \text{ g} = 4,960 \text{ kg}$$

http://www.estuvideo.com/video/sfR_bZ1Eig/Reaccion-quimica-10-Pureza-riqueza-reactivos.html

Rendimiento de una reacción química

La cantidad de producto que se obtiene si reacciona todo el reactivo limitante se denomina **el rendimiento teórico** de la reacción.

La cantidad de producto que se obtiene realmente en una reacción es **el rendimiento real**.

El rendimiento real es generalmente menor que el teórico.

El rendimiento porcentual o porcentaje del rendimiento describe la relación del rendimiento real y el rendimiento teórico:

$$(\%) R = \left(\frac{\text{Valor real.}}{\text{Valor teórico}} \right) \times 100$$

http://www.estuvideo.com/video/7KkscizdN_E/Reaccion-quimica-14-Rendimiento.html