

TEMA 1: CÁLCULOS NUMÉRICOS ELEMENTALES EN QUÍMICA.**ÍNDICE:**

TEMA 1: CÁLCULOS NUMÉRICOS ELEMENTALES EN QUÍMICA.....	1
1.- SUSTANCIAS QUÍMICAS.....	2
2.- MASA ATÓMICA, MASA MOLECULAR, MOL.....	3
3.- COMPOSICIÓN CENTESIMAL DE UN COMPUESTO.....	4
4.- DETERMINACIÓN DE LA FÓRMULA DE UN COMPUESTO POR ANÁLISIS ELEMENTAL: FÓRMULA EMPÍRICA Y MOLECULAR.....	6
5.- MEZCLAS. MEZCLAS HOMOGÉNEAS: MEZCLAS DE GASES; DISOLUCIONES LÍQUIDAS.....	7
6.- FORMAS DE EXPRESAR LA CONCENTRACIÓN DE LAS DISOLUCIONES.....	7
6.1.- Concentración en g/L.....	7
6.2.- Tanto por ciento en masa.....	7
6.3.- Tanto por ciento en volumen.....	7
6.4.- Fracción molar.....	8
6.5.- Molaridad o concentración molar.....	8
6.6.- Molalidad o concentración molal.....	8
7.- COMPORTAMIENTO DE LOS GASES EN CONDICIONES IDEALES. ECUACIÓN DE ESTADO. LEY DE DALTON DE LAS PRESIONES PARCIALES.....	8
7.1.- Ley de Avogadro.....	8
7.2.- Ley de Boyle.....	9
7.3.- Ley de Charles y Gay-Lussac.....	9
7.4.- Ecuación de estado de los gases.....	9
7.5.- Ley de Dalton.....	9
8.- DETERMINACIÓN DE LA MASA MOLECULAR DE UN GAS A PARTIR DE LOS VALORES DE MAGNITUDES RELACIONADAS CON LA ECUACIÓN DE ESTADO.....	10
9.- REACCIÓN QUÍMICA. ECUACIÓN QUÍMICA.....	11
TIPOS DE REACCIONES QUÍMICAS:.....	12
a) Síntesis o combinación:.....	12
b) Descomposición:.....	12
c) Desplazamiento o sustitución:.....	12
d) Doble desplazamiento o intercambio:.....	12
10.- CÁLCULOS ESTEQUIOMÉTRICOS:.....	12
10.1.- Cálculos con masas.....	12
10.2.- Caso de reacciones en las que participan gases y/o sustancias en disolución:.....	13
10.3.- Caso de reactivos con un determinado grado de pureza:.....	15
10.4.- Concepto y reconocimiento del reactivo limitante:.....	15
10.5.- Concepto de rendimiento de una reacción:.....	16

1.- SUSTANCIAS QUÍMICAS.

El mundo es una mezcla de sustancias que se encuentran en tres estados físicos diferentes. Los **gases**, tal como se encuentran en el aire, llenan cualquier recipiente que los contenga. Los **líquidos** son compactos pero suficientemente fluidos para adaptarse a la forma del recipiente hasta el volumen que ocupen. Los gases se contraen y expanden fácilmente, mientras que los líquidos son prácticamente incompresibles. Los **sólidos** son cuerpos rígidos que mantienen un volumen y forma definidos.

En un **sistema**, es decir, en una parte aislada del universo material, la materia puede existir en fases. Una fase es un sistema física y químicamente uniforme. La materia que posee una sola fase es considerada homogénea. Las fases se distinguen por límites claros, como los que existen entre sólido y líquido, entre líquido y gas, o entre materiales sólidos distintos. La materia que posee dos o más fases y sustancias distintas se considera heterogénea. Una sustancia pura en uno de los tres estados debe ser homogénea, pero una materia homogénea no es necesariamente una sustancia pura. Las mezclas homogéneas se llaman **disoluciones**.

Para identificar una sustancia debemos medir algunas de sus propiedades y compararlas con las de sustancias conocidas. También debemos poseer criterios para distinguir las sustancias puras de las disoluciones. Las propiedades extensivas dependen de la cantidad de materia presente. La masa, el volumen, el calor almacenado, son propiedades extensivas. Las propiedades intensivas, como la densidad o la temperatura, son independientes de la cantidad de materia presente.

Decimos que las sustancias tienen **propiedades físicas**, respuestas a estímulos que no cambian la composición del material, y **propiedades químicas**, respuestas a estímulos que cambian las sustancias en otras. Entre las propiedades físicas de las sustancias se encuentran la masa, densidad, forma, color, punto de fusión, punto de ebullición, el calor que debe eliminarse para solidificar una masa dada de líquido (o que debe añadirse para vaporizalo), el calor necesario para elevar la temperatura un determinado número de grados, su viscosidad, etc. Las propiedades químicas describen que nuevas sustancias pueden producirse a partir de una sustancia dada. Así, el agua puede descomponerse por electrólisis en hidrógeno y oxígeno, puede oxidar el carbón a monóxido de carbono o reducir el flúor a fluoruro de hidrógeno. etc. Todo cambio químico o físico es acompañado siempre por un cambio definido de energía. En las sustancias puras estas propiedades son fijas y constantes, mientras que en las disoluciones son variables.

A medida que la química se desarrolló a partir de la alquimia entre los siglos XVI y XIX, se hizo evidente que las sustancias puras con propiedades definidas estaban formadas en la mayoría de los casos por otras sustancias. Como por ejemplo, los cristales de vitriolo azul podían calentarse para obtener sulfato de cobre blanco y vapor de agua en una proporción en peso constante. Los químicos de aquel período razonaron que debía existir alguna sustancia, o sustancias elementales, que no habían podido ser descompuestas. La mayoría de los primeros intentos de definir las sustancias elementales estuvieron influenciados por las conclusiones de los antiguos filósofos griegos que afirmaron que la **tierra**, el **agua**, el **aire** y el **fuego** eran elementos. Ahora vemos que estos corresponden a los conceptos actuales de los tres estados de la materia (sólido, líquido y gas), y a lo mejor, al concepto de energía (fuego). En el siglo XVII Robert Boyle dio una definición operacional de un elemento que decía en síntesis, "**un elemento es una sustancia que gana siempre peso al sufrir un cambio químico**". Esta definición no nos permite identificar sin dudas una sustancia como elemento, ya que existe siempre la posibilidad de que pueda hallarse una reacción química que descomponga esta sustancia. Sin embargo, una sustancia que no se adapte a la definición de Boyle no puede ser considerada un elemento. A medida que aumentó la lista de los elementos, los químicos -en particular Antoine Lavoisier- desarrollaron un cierto instinto para reconocer las propiedades de los compuestos. Lavoisier incluso afirmó que la sosa cáustica (hidróxido

de sodio) era sin duda un compuesto veinte años antes de que hubiera sido posible descomponerla en los tres elementos que la constituyen.

¿Qué tipos de materiales fueron identificados cómo elementos? La mayoría de los metales puros son también elementos. Los metales comerciales e industriales, cobre, plata, oro, hierro, platino, plomo, aluminio, cinc, mercurio, níquel, uranio, magnesio, estaño y volframio, todos son elementos. De hecho de los 109 elementos conocidos, todos menos 22 tienen propiedades metálicas. Cinco de los elementos restantes (helio, neón, argón, criptón y xenón) fueron descubiertos en una mezcla de gases minoritarios cuando fueron eliminados el nitrógeno y el oxígeno del aire. Estos gases "nobles" eran considerados inertes a la combinación química hasta que en 1962 se hizo reaccionar el xenón con el flúor, el no metal químicamente más activo. Los demás no metales químicamente activos, o son gases (hidrógeno, nitrógeno, oxígeno y cloro), o sólidos cristalinos quebradizos (carbón, azufre, fósforo, arsénico e yodo). Sólo hay un elemento no metálico líquido en condiciones comunes, el bromo.

Los compuestos son sustancias puras formadas de dos o más elementos, que pueden descomponerse en estos por medios químicos.

2.- MASA ATÓMICA, MASA MOLECULAR, MOL.

La teoría atómica de Dalton, completada con las ideas de Avogadro, fue de una gran ayuda para el desarrollo de la química en el siglo XIX. Así incluso los últimos años del siglo XIX los átomos se consideraban como si fueran realmente esferitas indivisibles, inmutables, correspondiéndole a cada elemento átomos que tenían la misma masa y una naturaleza idéntica. La unión de los átomos, iguales o diferentes, originaba las moléculas.

Aunque ya por el 1830 los trabajos de Faraday sobre el electrólisis habían conducido a la hipótesis de que las partículas de la corriente eléctrica eran **electrones**, hubieron de pasar un montón de años, justamente hasta 1897, para que se confirmara la existencia de los electrones como componentes de la materia. Tal confirmación llegó al hacerse descargas eléctricas de alto voltaje en el seno de gases a presiones muy bajas. Se vio, entonces, que los electrones eran partículas constituyentes de todos los átomos y se obtuvo, experimentalmente, su masa y su carga, que resultaron ser iguales para todos ellos. La existencia de los electrones echó por tierra la hipótesis de la indivisibilidad de los átomos y mostró la complejidad de estos.

También en estos años se descubrió la radioactividad y los científicos, asombrados, comprobaron que ciertos elementos se transformaban, por sí mismos, unos en otros, descartando la hipótesis de la inmutabilidad de los átomos. Lo más frecuente es que los elementos radiactivos originen otros que también lo sean y de proseguir el proceso tenemos una cadena o serie radiactiva. Los físicos se enteraron de que algunos miembros de la cadena, químicamente, eran idénticos, aunque sus comportamientos radiactivos no habían tenido ninguna semejanza. Se supuso que se trataba del mismo elemento que estaría constituido, en cada caso, por átomos de masa distinta, a los que se nombró **isótopos**. Esta hipótesis, que contradice también la teoría atómica de Dalton, fue confirmada experimentalmente estudiando las desviaciones que sufren los iones positivos, que se producen en un tubo de descarga, al atravesar campos eléctricos y magnéticos. Hoy en día haciendo entrar un manojito de iones positivos de un elemento, a la misma velocidad, en un campo magnético uniforme se logra separar los iones según su masa. De este modo, en los llamados espectrómetros de masas, separamos los isótopos y obtenemos con muchísima precisión sus masas.

Para expresar las masas de los átomos se utiliza, en la actualidad, como **unidad la doceava parte de la masa del isótopo más abundante del carbono al que se le asigna 12 unidades de masa**

atómica, es decir, 12 u. Cuando decimos, como por ejemplo, que 23 es la masa de un átomo de sodio se trata de un valor relativo, referido al carbono-12, su masa es 23 u.

La **masa atómica** de un elemento es la masa media, en u., calculada teniendo en cuenta la masa de sus isótopos y el porcentaje que tiene el elemento de cada uno de ellos. Podemos así, hacer una escala de masas atómicas referidas al patrón carbono-12.

La **masa molecular** de una sustancia es la masa media, ponderada, de sus moléculas en unidades de masa atómica.

Conociendo la fórmula de la sustancia su masa molecular es muy fácil de obtener. Como por ejemplo: la fórmula del agua es H_2O y las masas atómicas $m_{\text{H}} = 1,008 \text{ u}$ y $m_{\text{O}} = 15,999 \text{ u}$, entonces

$$M(\text{H}_2\text{O}) = 2 \times 1,008 + 15,999 = 18,015 \text{ u}$$

En caso de que las sustancias no sean moleculares, seguimos hablando de masa molecular. Otros autores prefieren hablar, en este caso, de masa fórmula. Una fórmula en estas sustancias no representa una molécula, pues no hay moléculas. ¿Entonces que quiere decir que la fórmula de la sal común sea NaCl ? Pues sencillamente que en su red cristalina hay tantos iones cloruro (Cl^-) como iones sodio (Na^+)

Con todo y eso nosotros diremos que la masa molecular relativa del NaCl es

$$M_r(\text{NaCl}) = 22,99 + 35,45 = 58,44$$

El **número de Avogadro** (N_A) se define como el número de átomos de carbono que hay en 12g de C-12. Es decir,

$$N_A \times M(\text{C-12}) = 12\text{g} \quad N_A \times 12\text{u} = 12\text{g} \quad 1\text{u} = 1/N_A \text{ g}$$

Mol de un sistema material es la cantidad de sustancia que contiene un número de Avogadro (N_A) de partículas de ese sistema.

Así un mol de átomos de sodio serán N_A átomos de sodio, un mol de moléculas de cloro N_A moléculas de cloro, incluso, un mol de electrones son N_A electrones, etc.

El número de Avogadro se escoge de forma que la masa de un mol en gramos coincida, en valor absoluto, con la masa de una partícula (átomo o molécula) en u.

El número de Avogadro fue obtenido experimentalmente y vale

$$N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$$

Fíjate que así como una docena indica 12 objetos, un mol indica para el químico $6,02 \cdot 10^{23}$ objetos.

La masa de 1 mol en gramos la denominamos masa molar (M_m):

$$M_m(\text{Li}) = 6,94 \text{ g/mol}$$

$$M_m(\text{NaCl}) = 58,44 \text{ g/mol}$$

A partir de ahora tendrás que distinguir, por ejemplo para el agua:

$$\text{Masa molecular: } M(\text{H}_2\text{O}) = 18,015 \text{ u}$$

$$\text{Masa molecular relativa: } M_r(\text{H}_2\text{O}) = 18,015$$

$$\text{Masa molar: } M_m(\text{H}_2\text{O}) = 18,015 \text{ g mol}^{-1}$$

3.- COMPOSICIÓN CENTESIMAL DE UN COMPUESTO.

Para representar las distintas especies de átomos se emplean **símbolos**. Así, C es el símbolo del carbono; N, el del nitrógeno; F, el del flúor, etc.

Para representar las moléculas se usan las fórmulas. Una fórmula es un conjunto de símbolos y números en forma de subíndices. Como por ejemplo, H_2O_2 es la fórmula del agua oxigenada; Na_2S , la del sulfuro de sodio, $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ la del nitrato de bario; Cl_2 , la del cloro, etc.

Es decir, el símbolo representa a un átomo, mientras que la fórmula representa a una molécula.

La gran utilidad del empleo de las fórmulas, además de la simplicidad que suponen, radica en que nos expresan la composición cualitativa y cuantitativa de las moléculas. Así, H_2O_2 indica: 1º que el agua oxigenada está compuesta por dos elementos, hidrógeno y oxígeno, y 2º que cada una de sus moléculas está formada por 4 átomos: 2 de hidrógeno y 2 de oxígeno.

Un compuesto químico puro presenta la característica general de que los distintos elementos que lo forman se encuentran en proporción fija y definida, que viene dada por su fórmula. (Hay unos pocos compuestos a los que no se les puede asignar una fórmula química definida; son los compuestos "no estequiométricos"). A partir de la fórmula del compuesto y con ayuda de una tabla de masas atómicas, se puede calcular la proporción, en peso, de los distintos elementos presentes en un compuesto. Pero resulta más cómodo efectuar este cálculo a través del concepto de mol puesto que permite un uso razonable, y fácilmente comprensible, de las masas que se tienen de la sustancia.

Ejemplo: Calcula la composición centesimal, en peso, de cada uno de los siguientes compuestos: (a) KBr , (b) HNO_3 .

Se entiende por "composición centesimal" la relación entre la masa de cada elemento y la masa total del compuesto, expresada en porcentaje. Si se toma como punto de partida un mol de compuesto, se obtiene

$$\text{Porcentaje del elemento E} = \frac{\text{masa de E que hai en un mol} \times 100}{\text{masa molar}}$$

(a) Un mol de KBr contiene:

$$\begin{array}{r} 1 \text{ mol de K} \quad 39,1 \text{ g} \\ 1 \text{ mol de Br} \quad 79,9 \text{ g} \\ \hline \end{array}$$

$$\text{masa total} \quad 119,0 \text{ g}$$

$$\text{Porcentaje de potasio} = \frac{39,1}{119,0} \times 100 = 32,9\%$$

$$\text{Porcentaje de bromo} = \frac{79,9}{119,0} \times 100 = 67,1\%$$

(b) Un mol de HNO_3 contiene:

$$\begin{array}{r} 1 \text{ mol de H} \quad 1,01 \text{ g} \\ 1 \text{ mol de N} \quad 14,0 \text{ g} \\ 3 \text{ moles de O} \quad 48,0 \text{ g} \\ \hline \end{array}$$

$$\text{masa total} \quad 63,0 \text{ g}$$

$$\text{Porcentaje de hidrógeno} = \frac{1,01}{63,0} \times 100 = 1,6\%$$

$$\text{Porcentaje de nitrógeno} = \frac{14,0}{63,0} \times 100 = 22,2\%$$

$$\text{Porcentaje de oxígeno} = \frac{48,0}{63,0} \times 100 = 76,2\%$$

4.- DETERMINACIÓN DE LA FÓRMULA DE UN COMPUESTO POR ANÁLISIS ELEMENTAL: FÓRMULA EMPÍRICA Y MOLECULAR.

A fin de determinar los números relativos de los átomos de dos o más elementos que forman un compuesto, hace falta:

1. sintetizar una muestra pura del compuesto;
2. analizar el porcentaje en peso de cada elemento presente que contiene el compuesto;
3. dividir cada porcentaje por la masa atómica del elemento en cuestión. El resultado es el número de moles de átomos del elemento correspondiente;
4. dividiendo estos valores, del número de moles, por el valor más pequeño obtenemos la proporción en que participan los elementos en la fórmula del compuesto.

Ejemplo: Para cierto compuesto se encuentra la siguiente composición: 87,5% de nitrógeno y 12,5% de hidrógeno. ¿Qué fórmulas son posibles para este compuesto?

Primero se comprueba que los contenidos de nitrógeno e hidrógeno suman 100%, confirmando que sólo hay estos dos elementos.

En 100 g de compuesto hay 87,5 g de N y 12,5 g de H. Para transformar estas cantidades en moles, se divide cada una de ellas por la masa molar:

$$n_{\text{N}} = \frac{87,5 \text{ g}}{14,0 \text{ g mol}^{-1}} = 6,25 \text{ moles de N}$$

$$n_{\text{H}} = \frac{12,5 \text{ g}}{1,0 \text{ g mol}^{-1}} = 12,5 \text{ moles de H}$$

Los coeficientes estequiométricos serán:

$$\text{Para el N} = \frac{6,25}{6,25} = 1 \quad \text{Para el H} = \frac{12,5}{6,25} = 2$$

La fórmula más sencilla o fórmula empírica de este compuesto será: NH_2 ; pero cualquiera de sus múltiplos tendrá la misma composición, como por ejemplo, N_2H_4 , N_3H_6 , etc., o en general, $(\text{NH}_2)_n$, siendo n un número natural. Para encontrar la fórmula completa y correcta del compuesto falta un dato complementario, la masa molecular.

Ejemplo: Para el compuesto anterior se encuentra una masa molecular de 32 u ¿Cuál es su fórmula molecular?

La fórmula es un múltiplo de la más sencilla $(\text{NH}_2)_n$. Entonces su masa molecular será:

$$(14 + 2) \times n = 16 \times n = 32 \quad \text{de donde} \quad n = 2$$

La fórmula molecular del compuesto es $(\text{NH}_2)_2$ o N_2H_4 .

5.- MEZCLAS. MEZCLAS HOMOGÉNEAS: MEZCLAS DE GASES; DISOLUCIONES LÍQUIDAS.

Llamaremos **mezcla** a la combinación de dos o más sustancias (elementos o compuestos). Prácticamente todas las sustancias que nos rodean son mezclas. Podemos dividir las mezclas en mezclas heterogéneas y mezclas homogéneas. Serán **heterogéneas** cuando se puedan observar los componentes a simple vista o mediante el microscopio, serán **homogéneas** cuando sea imposible distinguir sus componentes.

Las mezclas homogéneas serán las que más nos interesen en este curso. Pueden presentarse en los tres estados de agregación: sólido, líquido y gas. Un ejemplo de mezcla homogénea sólida son las aleaciones de metales [Cu+Sn=bronce, Cu+Zn=latón, Fe+C+(otros metales)=aceros]. Como ejemplo de mezcla homogénea gaseosa está el aire que respiramos. Las mezclas homogéneas líquidas las denominamos **disoluciones**, donde distinguimos entre **disolvente** (o componente que está en mayor proporción) y **soluto** (componente minoritario). Las disoluciones las diferenciamos segundo la proporción soluto/disolvente en: disoluciones **diluidas**, cuando hay poco soluto para una cierta cantidad de disolvente; **concentradas**, cuando la cantidad de soluto es grande en proporción al disolvente; y **saturadas**, si el disolvente ya no admite más soluto.

6.- FORMAS DE EXPRESAR LA CONCENTRACIÓN DE LAS DISOLUCIONES.

Cuando trabajemos con disoluciones es imprescindible conocer o expresar la concentración de la misma. Entendemos por **concentración** de una disolución la **relación que hay entre la cantidad de soluto y la cantidad de disolvente o de disolución**.

La concentración la podemos expresar de las siguientes formas:

6.1.- Concentración en g/L

Nos da los gramos de soluto disueltos en cada litro de disolución. Este tipo de concentración lo encontramos en las etiquetas de agua mineral, para dar la composición de sales.

$$C \text{ (g/L)} = \frac{\text{masa de soluto (g)}}{\text{volumen de disolución (L)}} = \frac{m_s}{V_D}$$

6.2.- Tanto por ciento en masa

Nos da los gramos de soluto disueltos en cada 100 gramos de disolución. Aparece en muchos etiquetados de alimentos.

$$C \text{ (% en masa)} = \frac{\text{masa de soluto}}{\text{masa de disolución}} \cdot 100 = \frac{m_s}{m_D} \cdot 100$$

6.3.- Tanto por ciento en volumen

Nos da los ml de soluto disueltos en cada 100 ml de disolución. De esta forma se da el grado alcohólico de las bebidas alcohólicas, una cerveza de 6º quiere decir de 6% en volumen de alcohol.

$$C (\% \text{ en volumen}) = \frac{\text{volumen de soluto}}{\text{volumen de disolución}} \cdot 100 = \frac{V_s}{V_D} \cdot 100$$

6.4.- Fracción molar

La fracción molar del componente i de una disolución es la relación entre el número de moles de i y el número de moles totales de la disolución. Aparece este tipo de concentración en la ley de Raoult, y cuando queremos calcular la presión parcial de un gas a partir de la presión total.

$$\text{Fracción molar de } i = x_i = \frac{\text{n}^\circ \text{ de moles de } i}{\text{n}^\circ \text{ de moles totales}} = \frac{n_i}{n_t}$$

Para dos componentes de una disolución: soluto y disolvente:

$$x_s = \frac{n_s}{n_s + n_d} \quad x_d = \frac{n_d}{n_s + n_d} \quad x_s + x_d = 1$$

6.5.- Molaridad o concentración molar

Es la forma más frecuente de expresar la concentración de las disoluciones en el mundo de la química. La molaridad es la relación entre el número de moles de soluto y los litros de disolución. Se representa por M y sus unidades son mol/l.

$$M = \frac{\text{n soluto}}{\text{V(litros) disolución}} = \frac{\frac{\text{m(g) soluto}}{M_m}}{\text{V(litros) disolución}} = \frac{m_s}{M_m \cdot V_D}$$

6.6.- Molalidad o concentración molar

Es la relación entre el número de moles de soluto y los kilogramos de disolvente. Se representa por m y sus unidades son mol/kg. Aparece en el cálculos de los aumentos ebulloscopicos y descensos crioscópicos que experimentan las disoluciones.

$$m = \frac{\text{n soluto}}{\text{M(kg) disolvente}} = \frac{\frac{\text{m (g) soluto}}{M_m}}{\text{M(kg) disolvente}} = \frac{m_s}{M_m \cdot M_d}$$

7.- COMPORTAMIENTO DE LOS GASES EN CONDICIONES IDEALES. ECUACIÓN DE ESTADO. LEY DE DALTON DE LAS PRESIONES PARCIALES.

Todos los gases, independientemente de su naturaleza química o del tamaño de sus moléculas, responden a unas leyes muy sencillas.

7.1.- Ley de Avogadro.

En volúmenes iguales de gases diferentes hay el mismo número de moléculas cuando la temperatura y la presión son constantes. Por lo tanto el número de moléculas, y el número de moles, es proporcional al volumen, V , del gas:

$$V = k \cdot n \quad (P, T \text{ ctes})$$

7.2.- Ley de Boyle.

A temperatura constante, los volúmenes que ocupan una misma masa de gas son inversamente proporcionales a las presiones que soportan:

$$P \cdot V = k' \quad (T, n \text{ ctes})$$

7.3.- Ley de Charles y Gay-Lussac:

Todos los gases poseen igual coeficiente de dilatación, es decir, al producirse un mismo aumento de temperatura, el incremento del volumen es el mismo para todos.

La gráfica V-T es una recta, lo que confirma la relación lineal entre ambas magnitudes. El volumen del gas se va contrayendo a medida que la temperatura disminuye. Si esta es lo suficientemente baja el gas licúa (la recta se corta). Si prolongamos la recta obtenemos por extrapolación que la temperatura a la cual el volumen de cualquier gas debería ser nulo es -273°C . Esta temperatura se toma como cero de una nueva escala llamada absoluta o Kelvin, $-273^\circ\text{C}=0\text{K}$. Si T es la temperatura absoluta y t la centígrada, se cumple que

$$T = t + 273$$

Expresando la temperatura en grados Kelvin, la ley de Charles y Gay-Lussac queda en una forma muy sencilla: a presión constante, el volumen de una misma masa de gas es directamente proporcional a la temperatura absoluta:

$$V = k'' \cdot T \quad (P, n \text{ ctes})$$

7.4.- Ecuación de estado de los gases:

Esta ecuación abarca a las tres leyes anteriores:

$$\left. \begin{array}{l} V = k \cdot n \\ V = k' \frac{1}{P} \\ V = k'' \cdot T \end{array} \right\} \quad V = R \frac{n T}{P}$$

O también

$$P V = n R T$$

llamada **ecuación de estado del gas ideal**, válida para el estudio de los gases a presiones bajas. La presiones elevadas las interacciones entre las moléculas y el propio tamaño de las mismas hace preciso introducir parámetros correctores en esta ecuación.

Las tres ecuaciones se pueden reunir en una sola, donde R es la constante de proporcionalidad que engloba las anteriores k, k', k''.

El valor de R se halla sabiendo que un mol de gas ocupa 22,4 L a 1 atmósfera y 273 K:

$$R = \frac{P V}{n T} = \frac{1 \text{ atm } 22,4 \text{ l}}{1 \text{ mol } 273 \text{ K}} = 0,082 \frac{\text{ atm l}}{\text{ mol K}}$$

7.5.- Ley de Dalton.

Bajo el supuesto de que las moléculas de los gases ideales no interaccionan ni ocupan volumen, las moléculas de un gas no ejercerán ningún efecto sobre las de otro gas. Por tanto si vamos inyectando varios gases A, B, C,... en un recipiente de volumen V a la temperatura T, cada gas de la disolución ejercerá la misma presión que si estuviera él sólo en el recipiente. La **ley de Dalton** nos dice que en una

mezcla gaseosa, **la presión total de la mezcla es la suma de las presiones parciales de los gases que la forman.**

$$P_A V = n_A R T, \quad P_B V = n_B R T, \quad P_C V = n_C R T \dots$$

siendo $P_A, P_B, P_C \dots$ las presiones parciales de cada gas en la disolución. Sumando estas presiones parciales:

$$(P_A + P_B + P_C \dots) V = (n_A + n_B + n_C \dots) R T$$

y como el segundo paréntesis es el número total de moles de la mezcla, n_t , el primero será la presión total, P_t , ejercida por la mezcla, es decir

$$P_t = P_A + P_B + P_C + \dots$$

Para las mezclas de gases ideales vimos

$$P_A V = n_A R T$$

$$P_t V = n_t R T$$

y dividiendo

$$\frac{P_A}{P_t} = \frac{n_A}{n_t} = \chi_A$$

para cualquier gas de la disolución:

$$P_A = \chi_A P_t$$

8.- DETERMINACIÓN DE LA MASA MOLECULAR DE UN GAS A PARTIR DE LOS VALORES DE MAGNITUDES RELACIONADAS CON LA ECUACIÓN DE ESTADO.

La densidad de un gas se define cómo la relación, o cociente, entre una masa de gas y el volumen que ocupa.

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

Lo más frecuente es expresar la densidad del gas en gramos por litro, en C.N. Si se elige el volumen de 22,4 litros, entonces la densidad del gas es la masa en gramos de 22,4 l del mismo, pero como la masa en gramos de 22,4 l de un gas en C.N. es la masa molar del mismo, resulta que la densidad de un gas en C.N. en gramos por 22,4 l tiene el mismo valor que la masa molar. De esto se deduce que la densidad de un gas en g/l y C.N. se obtendrá simplemente por división de la masa molar por 22,4 l. O viceversa, la masa molecular de un gas se puede obtener por multiplicación de su densidad en g/l en C.N. por 22,4 l.

$$P V = n R T \quad P V = \frac{m}{M_m} R T \quad P M_m = \frac{m}{V} R T \quad P M_m = d R T$$

$$M_m = \frac{d R T}{P} = d \frac{0,082 \cdot 273}{1} = d \cdot 22,4$$

$$M_m = 22,4 \cdot d$$

Como la densidad del aire es 1,29 g/l podemos encontrar una expresión que nos permita calcular la masa molecular de un gas en C.N. a partir de la densidad relativa del gas:

$$d_r = \frac{d_{\text{gas}}}{d_{\text{aire}}} \quad d_{\text{gas}} = d_r \cdot d_{\text{aire}}$$

$$M_m = 22,4 \cdot d_{\text{gas}} = 22,4 \cdot d_r \cdot d_{\text{aire}} = 22,4 \cdot 1,29 \cdot d_r$$

$$M_m = 28,9 \cdot d_r$$

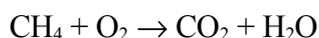
Ejercicio: Calcula la masa molecular del butano sabiendo que su densidad es de 2,732 g/l en C.N.

Ejercicio: Si la densidad relativa del amoniaco en C.N. es de 0,597, calcula su masa molecular.

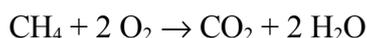
9.- REACCIÓN QUÍMICA. ECUACIÓN QUÍMICA.

Las ecuaciones químicas son la representación de las reacciones químicas o transformaciones químicas, y constan de dos miembros; en el primero se indican las fórmulas de las sustancias iniciales, que se denominan **reactivos**, y en el segundo las de las sustancias que se obtienen, y se denominan **productos**. Los miembros se separan por una flecha (\rightarrow) para señalar el sentido de una reacción o dos flechas con los sentidos contrarios (\leftrightarrow) para indicar que la reacción está en equilibrio, es decir, que coexisten sustancias reaccionantes y productos.

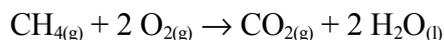
Por ejemplo, en la combustión del metano se produce dióxido de carbono y agua. La ecuación que representa esta reacción es:



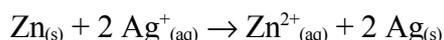
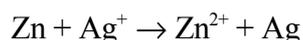
Para que la ecuación cumpla con la ley de conservación de la masa es imprescindible que esté **ajustada** o igualada, es decir, que haya el mismo número de átomos en cada miembro de la ecuación. Se utilizan entonces unos números, los **coeficientes estequiométricos**, que se colocan delante de las fórmulas e indican el número relativo de moléculas.

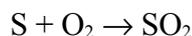
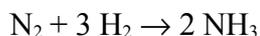
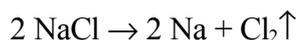
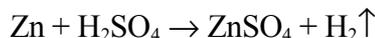
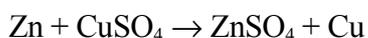
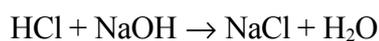
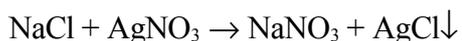


En determinados casos hace falta especificar el estado físico: sólido (s), líquido (l), gas (g), o disolución acuosa (aq), en que se encuentran las sustancias en las condiciones de la reacción.



Si en la reacción intervienen iones, hay que igualar las cargas, para que cumpla la ley de conservación de la carga. Como por ejemplo:



TIPOS DE REACCIONES QUÍMICAS:**a) Síntesis o combinación:****b) Descomposición:****c) Desplazamiento o sustitución:****d) Doble desplazamiento o intercambio:****10.- CÁLCULOS ESTEQUIOMÉTRICOS:**

Las ecuaciones químicas suministran la información necesaria para calcular las cantidades de sustancias consumidas o producidas en las reacciones químicas.

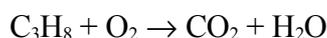
Para efectuar los cálculos sobre una reacción, además de tener la correspondiente reacción ajustada, hace falta conocer por lo menos la cantidad de una de las sustancias que intervienen en la reacción, pudiéndose calcular las cantidades de las demás sustancias.

10.1.- Cálculos con masas.

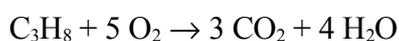
Una vez que tenemos la ecuación química ajustada podemos establecer proporciones entre los reactivos y productos a través del concepto de mol. En estos problemas tendremos un dato y una incógnita que calcular. Se supone que de los demás reactivos tenemos exceso para que la reacción pueda ser completa.

Ejemplo: Calcula los gramos de propano que tenemos que quemar en presencia de oxígeno para obtener 500g de dióxido de carbono.

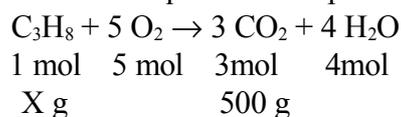
1º) Escribimos la ecuación química de la reacción:



2º) Ajustamos la ecuación:



3º) Situamos debajo de cada sustancia los datos que nos da el problema:



4º) Partiendo del dato conocido y de las relaciones en moles de las sustancias llegamos a la incógnita mediante factores de conversión:

$$500 \text{g CO}_2 \cdot \frac{1 \text{ mol CO}_2}{44 \text{g CO}_2} \cdot \frac{1 \text{ mol C}_3\text{H}_8}{3 \text{ mol CO}_2} \cdot \frac{44 \text{g C}_3\text{H}_8}{1 \text{ mol C}_3\text{H}_8} = 166,67 \text{g C}_3\text{H}_8$$

10.2.- Caso de reacciones en las que participan gases y/o sustancias en disolución:

Si intervienen gases en una reacción, su cantidad puede darse también en volumen, recordando que un mol de gas en condiciones normales (P=1 atm y T=273K) ocupa 22,4 l. Si las condiciones del laboratorio fueran otras usaremos la ecuación de estado de los gases ideales:

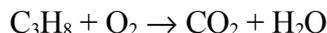
$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

$$R = 0,082 \frac{\text{atm} \cdot \text{l}}{\text{mol} \cdot \text{K}} = 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

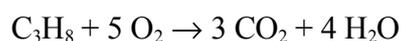
Recuerda que 1 atm = 760 mm Hg = 101300 Pa

Ejemplo: Calcula los litros de CO₂ en C.N. que se obtienen al quemar 100g de propano.

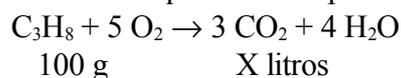
1º) Escribimos la ecuación química de la reacción:



2º) Ajustamos la ecuación:



3º) Situamos debajo de cada sustancia los datos que nos da el problema:

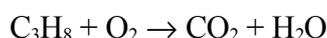


4º) Partiendo del dato conocido y de las relaciones en moles de las sustancias llegamos a la incógnita mediante factores de conversión:

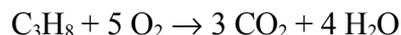
$$100 \text{g C}_3\text{H}_8 \cdot \frac{1 \text{ mol C}_3\text{H}_8}{44 \text{g C}_3\text{H}_8} \cdot \frac{3 \text{ mol CO}_2}{1 \text{ mol C}_3\text{H}_8} \cdot \frac{22,4 \text{L CO}_2}{1 \text{ mol CO}_2} = 152,73 \text{L CO}_2$$

Ejemplo: Calcula los litros de CO₂, a 10°C y 735 mm de presión, que se obtienen al quemar 100g de propano.

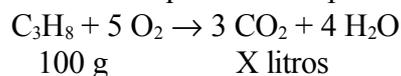
1º) Escribimos la ecuación química de la reacción:



2º) Ajustamos la ecuación:



3º) Situamos debajo de cada sustancia los datos que nos da el problema:



4º) Partiendo del dato conocido y de las relaciones en moles de las sustancias llegamos a la incógnita mediante factores de conversión, pero debemos calcular antes el volumen de un mol de gas en las condiciones del problema:

$$V = \frac{n \cdot R \cdot T}{P} = \frac{1 \text{ mol CO}_2 \cdot 0,082 \frac{\text{atm} \cdot \text{l}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 283\text{K}}{735\text{mm} \cdot \frac{1\text{atm}}{760\text{mm}}} = 24,00 \text{ L CO}_2$$

$$100\text{g C}_3\text{H}_8 \cdot \frac{1 \text{ mol C}_3\text{H}_8}{44\text{g C}_3\text{H}_8} \cdot \frac{3 \text{ mol CO}_2}{1 \text{ mol C}_3\text{H}_8} \cdot \frac{24,0 \text{ l CO}_2}{1 \text{ mol CO}_2} = 163,6 \text{ l CO}_2$$

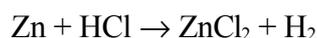
En los laboratorios, la mayor parte de los reactivos se encuentran en disolución. Entre sus ventajas podemos señalar:

1º.- Una reacción entre sólidos tiene lugar lentamente pues sólo puede producirse en la superficie de contacto. Mientras que si se disuelven, se dispersan como iones o moléculas y el contacto será más íntimo, y la reacción más rápida.

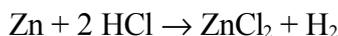
2º.- Utilizando disoluciones diluídas de concentración conocida se pueden manejar cantidades ínfimas de sustancia.

Ejemplo: Calcula la masa de Zn que reacciona con 250ml de HCl 0,5M para obtener cloruro de cinc, ZnCl₂ e hidrógeno, H₂.

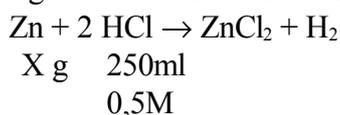
1º) Escribimos la ecuación química de la reacción:



2º) Ajustamos la ecuación:



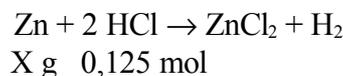
3º) Situamos debajo de cada sustancia los datos que nos da el problema, pero podemos calcular primero los moles de HCl o la masa de HCl y luego realizar los cálculos con ese valor:



4º) Partiendo del dato conocido y de las relaciones en moles de las sustancias llegamos a la incógnita mediante factores de conversión, pero debemos calcular primero el soluto puro que tenemos. Si la concentración es la molaridad calcularemos el número de moles, pero si la concentración es una masa partido por volumen será mejor calcular la masa de soluto:

$$n_s = M \cdot V_D = 0,5 \text{ mol/L} \cdot 0,25 \text{ L} = 0,125 \text{ mol HCl}$$

Haremos los cálculos ahora a partir del soluto puro:



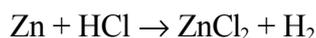
$$0,125 \text{ mol HCl} \cdot \frac{1 \text{ mol Zn}}{2 \text{ mol HCl}} \cdot \frac{65,4 \text{ g Zn}}{1 \text{ mol Zn}} = 4,09 \text{ g Zn}$$

10.3.- Caso de reactivos con un determinado grado de pureza:

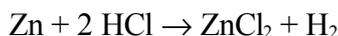
Si hay alguna sustancia impura, sólo la parte pura intervendrá en la reacción. De ahí la necesidad de conocer el grado de pureza de los reactivos.

Ejemplo: Calcula el volumen de H_2 en C.N. Que se obtiene tratando 20,0g de Zn de 85% de pureza con ácido clorhídrico, HCl, sabiendo que también se obtiene ZnCl_2 .

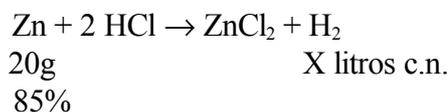
1º) Escribimos la ecuación química de la reacción:



2º) Ajustamos la ecuación:



3º) Situamos debajo de cada sustancia los datos que nos da el problema. Calculamos primero la masa real de Zn que reacciona y luego realizar los cálculos con ese valor:



4º) Calculamos la cantidad de sustancia pura que será la que utilicemos para realizar los cálculos:

$$20\text{g} \cdot 85\% = 17\text{g Zn puros}$$

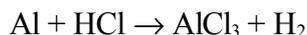
$$17\text{g Zn} \cdot \frac{1 \text{ mol Zn}}{65,4 \text{ g Zn}} \cdot \frac{1 \text{ mol H}_2}{1 \text{ mol Zn}} \cdot \frac{22,4 \text{ L H}_2}{1 \text{ mol H}_2} = 5,82 \text{ L H}_2$$

10.4.- Concepto y reconocimiento del reactivo limitante:

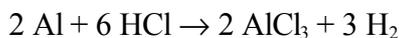
La cantidad de un determinado reactivo puede limitar la cantidad de producto que puede formarse. Denominaremos **reactivo limitante** a tal reactivo. **Para reconocerlo observaremos el cociente entre el número de moles y el coeficiente estequiométrico para cada reactivo**, el que presente menor valor será lo reactivo limitante.

Ejemplo: Disponemos de 100 g de Al y 200 g de HCl en forma de ácido clorhídrico, ¿qué volumen de hidrógeno, en condiciones normales, podemos obtener?

1º) Escribimos la ecuación química de la reacción:



2º) Ajustamos la ecuación:



3º) Situamos debajo de cada sustancia los datos que nos da el problema. Calculamos primero la masa real de Zn que reacciona y luego realizar los cálculos con ese valor:



4º) En este caso tenemos dos datos del que partir, sólo será válido el reactivo que esté en menor proporción. Lo calcularemos dividiendo los moles por el coeficiente estequiométrico, el que dé menor valor será el reactivo limitante. Partiendo de ese dato y de las relaciones en moles de las sustancias llegamos a la incógnita mediante factores de conversión:

$$\frac{n_{\text{Al}}}{\text{coef.}} = \frac{m}{M_m} = \frac{100\text{g}}{27\text{g/mol}} = 1,85 \quad \frac{n_{\text{HCl}}}{\text{coef.}} = \frac{m}{M_m} = \frac{200\text{g}}{36,5\text{g/mol}} = 0,91$$

El reactivo limitante es el HCl, usaremos 200g HCl como dato

$$200\text{g HCl} \cdot \frac{1 \text{ mol HCl}}{35,5\text{g HCl}} \cdot \frac{3 \text{ mol H}_2}{6 \text{ mol HCl}} \cdot \frac{22,4\text{L H}_2}{1 \text{ mol H}_2} = 63,10\text{L H}_2$$

10.5.- Concepto de rendimiento de una reacción:

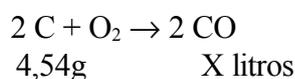
Rara vez las reacciones dan un rendimiento del 100%, es decir, los reactivos no acostumbran a convertirse enteramente en productos. Unas veces es consecuencia de que la reacción alcanza un estado de equilibrio, y otras porque ocurren reacciones secundarias en las que los mismos reactivos originan algunos productos secundarios paralelamente a los principales.

Entendemos por rendimiento de una reacción el cociente entre la cantidad de producto obtenido y la cantidad de producto que se debería obtener teóricamente, dándose el resultado en tanto por cien.

Mientras no se diga el contrario se supone que el rendimiento es del 100%.

$$\text{Rendimiento} = \frac{\text{Cantidad real de producto}}{\text{Cantidad teórica de producto}} \cdot 100$$

Ejemplo: La reacción de combustión del carbono en cantidad controlada de oxígeno produce monóxido de carbono: $2 \text{C} + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{CO}$. La cantidad de este último es menor que la teórica debido a que también tiene lugar la reacción $\text{C} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$. Si a partir de 4,54 g de C se obtienen 7,29 l de CO a 22°C e 764 mmHg. ¿Cuál es el rendimiento de la reacción?



Calculamos el volumen de CO que deberíamos obtener:

$$V = \frac{n \cdot R \cdot T}{P} = \frac{1 \text{ mol CO} \cdot 0,082 \frac{\text{atm} \cdot \text{l}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot (273 + 22)\text{K}}{764\text{mm} \cdot \frac{1\text{atm}}{760\text{mm}}} = 24,06 \text{ L CO}$$

$$4,54\text{g C} \cdot \frac{1 \text{ mol C}}{12\text{g C}} \cdot \frac{2 \text{ mol CO}}{2 \text{ mol C}} \cdot \frac{24,06\text{L CO}}{1 \text{ mol CO}} = 9,10\text{L CO teóricos}$$

$$\text{Rendimiento} = \frac{\text{Cantidad real de producto}}{\text{Cantidad teórica de producto}} \cdot 100 = \frac{7,29}{9,10} \cdot 100 = 80,1\%$$