

Tema 1. La química y sus cálculos

1. La composición de la materia

Leyes de combinaciones químicas

- **Ley de conservación de la materia (Lavoisier):** En una reacción química, la masa de los reactivos es igual a la masa de los productos
- **Ley de las proporciones constantes o definidas (Proust):** Un compuesto tiene siempre los mismos elementos en las mismas proporciones
- **Ley de las proporciones múltiples (Dalton):** Dos elementos A y B, se pueden combinar entre sí para formar varios compuestos distintos. Las masas de A y B están en relación con números enteros y sencillos
Ejemplo: Cu y O: CuO, Cu₂O
 Cl y O: Cl₂O, Cl₂O₃, Cl₂O₅, Cl₂O₇
- **Ley de las proporciones recíprocas o pesos de combinación (Ritcher):** si 100 gramos de A pueden combinarse con 200 gramos de C, y 50 gramos de B también pueden combinarse con 200 gramos de C, entonces 100 gramos de A pueden relacionarse con 50 gramos de B

Ejemplo: Sean las proporciones respecto al oxígeno en las siguientes reacciones:

$2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$; para 1 gramo de oxígeno se unen con 0,125 de hidrógeno para formar agua

$2\text{Cl}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{Cl}_2\text{O}$; para 1 gramo de oxígeno se unen con 4,43 de cloro para formar Cl₂O

Las proporciones del cloro y del hidrógeno guardan la relación: $4,43/0,125 = 35,45$

Si tomamos el H y el Cl para formar HCl:

$\text{H}_2 + \text{Cl}_2 \rightarrow 2\text{HCl}$; para dar 1 gramo de hidrógeno se unen 35,45 de cloro

Por lo tanto, se cumple la ley al comparar las dos proporciones

Sustancia pura. Elementos y compuestos

- **Sustancia pura:** materia formada por átomos o moléculas, todos iguales y que puede descomponerse por procesos físicoquímicos sencillos
- **Sustancia pura simple:** formada por átomos iguales. Se pueden descomponer químicamente en elementos
Ejemplo: Hierro (Fe), oxígeno (O₂), calcio (Ca)
- **Compuesto:** combinación de dos o más elementos. Formado por moléculas, y cada molécula está formada por átomos distintos
Ejemplo: agua, alcohol

2. Unidad de la cantidad de sustancia: el mol

- **Unidad de masa atómica (uma) = peso atómico del elemento**

- Los pesos atómicos se representan siempre con 4 cifras significativas:

C = 12,011

O = 15,9994

Cl = 32,06

H = 1,0079

- **Masa molecular (M)** = suma de los pesos atómicos de todos los átomos de una molécula

Ejemplo: Etileno C₂H₄ = 2 (12 uma) + 4 (1 uma) = 28 uma

- **Masa fórmula (M_f)** = masa molecular (M) pero para el caso de compuestos iónicos

Ejemplo: CaCl₂ = 1 (40,1 uma) + 2 (35,5 uma) = 111,1 uma

Concepto de mol. Número de Avogadro

- La cantidad de átomos o moléculas se cuentan por moles.
- **1 mol de átomos / moléculas = Número de Avogadro = 6,023 x 10²³ átomos / moléculas**
- **Mol: Es la cantidad de sustancia que contiene 6,023 x 10²³ átomos / moléculas**
- **Número de Avogadro = número de unidades de masa atómica que equivalen a 1 gramo**

Ejemplo: Peso atómico oxígeno: 16 uma

Si reunimos 6,023 x 10²³ átomos, el conjunto pesará 16 g

1 mol de átomo de oxígeno (6,023 x 10²³ átomos) pesa 16 g

- La razón de las masas de un mol de átomos A a un mol de átomos B = a la razón de un átomo simple de A a uno simple de B

3. El estudio de los gases

Ley de Boyle:

Experimento: variaciones del volumen ocupado por un gas a una temperatura constante. Si **cambia el volumen, cambia la presión**

- Se realizaron medidas presión-volumen con hidrógeno
- Se observó que si $\uparrow P \Rightarrow \downarrow V$, de manera que $PV = cte$

$$PV = k; \quad P_1 V_1 = P_2 V_2 \quad \text{a } T = cte$$

Ley de Charles-Gay Lussac (a P=cte):

$$V = cte \cdot T; \quad cte = n \cdot R/P$$

Donde R es la ideal o universal de los gases $R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$

$$^{\circ}\text{C} = \text{K} - 273,15 \quad 273,15 \text{ K} = 0^{\circ}\text{C}$$

Ley de Avogadro: a P y T = cte, el volumen de una muestra de gas es proporcional al número de moléculas de la muestra $V \propto n$ (a T, P, constantes)

Comportamiento ideal y real:

- A $\downarrow P$ y T^a moderada \Rightarrow comportamiento como **gas ideal**
- A $\uparrow P$ y T^a $\downarrow \Rightarrow$ comportamiento como **gas real**

Ecuación de los gases ideales:

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

- Para una misma cantidad de gas, $n_1 = n_2 \Rightarrow \frac{P_1 \cdot V_1}{T_1} = \frac{P_2 \cdot V_2}{T_2}$

Volumen molar = volumen que ocuparía 1 mol de un gas ideal a cualquier presión y temperatura.

- Se toma como referencia T = 0°C, P = 1 atm (760 mmHg) \Rightarrow **CONDICIONES NORMALES (C.N.)**
1 mol de cualquier gas en C.N. ocupa un volumen de 22,4 L

Densidad de un gas:

$d = m/V$; $n = m/M_m$ sustituyendo en la ecuación de los gases ideales: $P \cdot V = \left(\frac{m}{M_m}\right) R \cdot T$

$$M_m = \frac{d \cdot R \cdot T}{P}$$

Ley de Dalton sobre las presiones parciales: la presión total ejercida por una mezcla de gases es igual a la suma de las presiones parciales de los gases individuales

- Presión parcial: presión que ejercería un gas si fuese el único en el recipiente

$$P_i = \frac{n_i \cdot R \cdot T}{V}; \quad P_i = P_{\text{total}} \cdot X_i; \quad X_i = n_i / n_{\text{total}}$$

4. Determinación de fórmulas químicas

Fórmula molecular: indica el número de moles de átomos de cada elemento en 1 mol de moléculas de compuesto

Ejemplo: C₁₀H₁₄N₂ (nicotina), esta molécula consta de:

- 10 átomos de carbono
- 14 átomos de hidrógeno
- 2 átomos de nitrógeno

- Análisis elemental:** determinar los porcentajes de cada elementos a partir de la fórmula molecular

Ejemplo: realiza el análisis elemental del ácido butírico C₄H₈O₂

1º Calculamos el nº de moles de átomos de C, H, O en 1 mol de C₄H₈O₂

Un mol de molécula de C₄H₈O₂ consta de:

4 átomos de C; 8 átomos de H; 2 átomos de O

2º Calculamos el peso de los moles de átomos de cada elemento

Pesos atómicos:

C = 12 (1 mol de átomos de C pesa 12 g); 4 moles de átomos de C pesan = 48 g de C

H = 1,01 (1 mol de átomos de H pesa 1 g); 8 moles de átomos de H pesan = 8,08 g de H

O = 16 (1 mol de átomos de O pesa 16 g); 2 moles de átomos de O pesan = 32 g de O

3º Calculamos la masa de 1 mol de C₄H₈O₂ = 48 + 8,08 + 32 = 88,1 g

4º Determinamos la composición porcentual de cada elemento:

$$\% \text{ C} = \frac{48 \text{ g}}{88 \text{ g}} \times 100 = 54,5 \%; \quad \% \text{ H} = \frac{8,08 \text{ g}}{88 \text{ g}} \times 100 = 9,17 \%; \quad \% \text{ O} = \frac{32 \text{ g}}{88 \text{ g}} \times 100 = 36,3 \%$$

5. Disoluciones. Unidades de concentración

- Disolución:** mezcla homogénea de dos o más sustancias con las mismas propiedades fisicoquímicas en todos sus puntos:

Disolvente: sustancia en **mayor proporción** (~ líquido)

Soluto: sustancia en **menor proporción** (~ soluto)

- Solubilidad:** máxima cantidad de una sustancia que se disuelve en 100 g de agua
- Disolución saturada:** cuando se alcanza la cantidad máxima de soluto (**precipitado**)

Unidades de concentración:

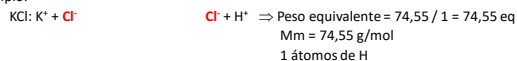
- Porcentaje en masa, **% en masa**: gramos de soluto contenidos en 100 gramos de disolución
- % en masa = $\frac{\text{masa de soluto}}{\text{masa de disolución}} \cdot 100$
- % en volumen = $\frac{\text{volumen de soluto}}{\text{volumen de disolución}} \cdot 100$
- Molaridad, $M = \frac{\text{moles de soluto}}{\text{volumen de disolución (en L)}}$
- Normalidad, $N = \frac{\text{n}^\circ \text{ equivalentes de soluto}}{\text{volumen de disolución (en L)}}$ $\text{N}^\circ \text{ equivalentes} = \frac{\text{masa de soluto (en g)}}{\text{masa molar equivalente (Meq)}}$
 $\text{Meq} = \frac{M}{\text{valencia}}$ $N = \left[\frac{m(g)}{M_m \cdot V(L)} \right] \cdot (\text{valencia})$
- Molalidad, $m = \frac{\text{moles de soluto}}{\text{masa del disolvente (en kg)}}$ (para cálculos de presión osmótica)
- Fracción molar, $X_i = \frac{\text{moles de } i}{\text{moles totales}} = \frac{n_i}{n_{\text{total}}}$

Cálculo de la normalidad N (eq/L)

- **Equivalente** = Porción de un compuesto químico cuya masa sustituye o es capaz de reaccionar con un átomo de hidrógeno (H⁺)
- **Peso equivalente para Ácidos** = Masa molecular / n^o de H⁺ (contenidos en la fórmula)
- Ejemplo:
 - $\text{H}_2\text{SO}_4 \Rightarrow$ Peso equivalente = $98 / 2 = 49$ eq
 Mm = 98 g/mol
 2 átomos de H
 - $\text{HCl} \Rightarrow$ Peso equivalente = $36,6 / 1 = 36,6$ eq
 Mm = 36 g/mol
 1 átomos de H

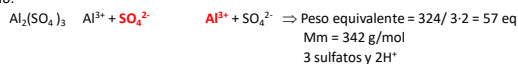
- **Peso equivalente para Bases** = Masa molecular / n^o de OH⁻ (contenidos en la fórmula)
- **Peso equivalente para Sales (simples)** = Masa molecular / n^o de H⁺
 (nos fijamos en el **anión**)

Ejemplo:



- **Peso equivalente para Sales (complejas)** = Masa molecular / n^o aniones x valencia anión (carga)

Ejemplo:



Determine la concentración en equivalentes por litro (normalidad) de una solución que fue preparada disolviendo 15 gramos de H₃PO₄ en suficiente agua hasta completar 650 ml de solución.

Datos:

N = ?
 g soluto = 15 gramos
 V = 650ml
 Masa molecular H₂SO₄ = 98 g/mol

- **Paso # 1. Cálculo del peso equivalente del soluto H₂SO₄**

$$\text{Peq} = \frac{98 \text{ g/mol}}{2} = 49 \text{ g/eq}$$

- **Paso # 2. Transformación del volumen en litros.**

$$\begin{array}{l} 1 \text{ litro} \text{-----} 1000 \text{ ml} \\ X \text{ litro} \text{-----} 650 \text{ ml} \end{array}$$

$$X = 0,65 \text{ litros}$$

- **Paso # 3. Cálculo de la Normalidad.**

$$\begin{aligned} N &= \frac{\text{gramos soluto}}{\text{Peq} \times V \text{ (litros)}} \\ N &= \frac{15 \text{ gramos}}{49 \text{ g/eq} \times 0,65 \text{ L}} \\ N &= \frac{15}{31,85} \\ N &= 0,47 \text{ eq/L} \end{aligned}$$

6. Estequiometría de las reacciones químicas

Ecuaciones químicas: Reactivos → Productos

- **Información adicional:**

Estado de agregación: sólido (s), líquido (l), gas (g)

Condiciones de la reacción: catalizadores y calentamiento

Energía de la reacción: se absorbe calor (reacción endotérmica), o se desprende calor (reacción exotérmica) ΔH°

- **Ajuste de la reacción:** es encontrar los coeficientes estequiométricos que hagan que dicha ley se cumpla

Suma de masa de reactivos = Suma de masa productos

- **Reactivo limitante:** es el que primero se consume en la reacción

Importante!! Hay que identificarlo al principio ya que todos los cálculos numéricos parten de él

- **(%) Rendimiento** = $\frac{\text{Rendimiento real}}{\text{Rendimiento teórico}} \cdot 100$
 - Rendimiento teórico = se calcula con los datos
 - Rendimiento real = obtenida experimentalmente (lo tienen que dar en un problema)

Cálculos del reactivo limitante

Haces reaccionar 21,3 g de nitrato de plata con 33,5 g de cloruro de aluminio para preparar cloruro de plata y nitrato de aluminio. ¿Cuál es el reactivo limitante?

Masas atómicas relativas: N = 14 ; O = 16 ; Al = 27 ; Cl = 35,5; Ag = 107,9

Escribe la ecuación química ajustada: $3\text{AgNO}_3 + \text{AlCl}_3 \rightarrow \text{Al}(\text{NO}_3)_3 + 3\text{AgCl}$

Calcula la cantidad de AgNO_3 y de AlCl_3 , previo cálculo de las masas molares:

$$M(\text{AgNO}_3) = 169,9 \text{ g/mol} ; M(\text{AlCl}_3) = 133,5 \text{ g/mol}$$

$$n(\text{AgNO}_3) = 21,3 \text{ g de AgNO}_3 \cdot 1 \text{ mol de AgNO}_3 / 169,9 \text{ g de AgNO}_3 = \mathbf{0,125 \text{ mol de AgNO}_3}$$

$$n(\text{AlCl}_3) = 33,5 \text{ g de AlCl}_3 \cdot 1 \text{ mol de AlCl}_3 / 133,5 \text{ g de AlCl}_3 = \mathbf{0,25 \text{ mol de AlCl}_3}$$

La proporción estequiométrica indica que:

$$3 \text{ mol de AgNO}_3 / 1 \text{ mol de AlCl}_3 = 0,125 \text{ mol de AgNO}_3 / n(\text{AlCl}_3) \\ n(\text{AlCl}_3) = \mathbf{0,041 \text{ mol de AlCl}_3}$$

Como $0,041 < 0,25$, el **reactivo limitante es el AgNO_3** , que se consume totalmente, mientras que está en exceso el cloruro de aluminio.