

TEMA 1. CÁLCULOS NUMÉRICOS ELEMENTALES EN QUÍMICA

1. SUSTANCIAS QUÍMICAS.

Una sustancia pura o especie química es un sistema homogéneo a la que se puede asignar un nombre y una fórmula propios. No se puede separar en diversos componentes mediante métodos físicos. Ejemplos: agua (H₂O), gas oxígeno (O₂), cloruro de sodio (NaCl), ... Se pueden clasificar como:

- Elementos químicos: están formados por átomos de igual número atómico (iguales) y no se pueden descomponer en otros más sencillos ni por métodos físicos ni químicos. Ejemplo: gas hidrógeno (H₂), sodio (Na), gas cloro (Cl₂), ... De los 111 la mayoría son sólidos, algunos son gases y muy pocos líquidos.
- Compuestos químicos: están formados por átomos de dos o más elementos y se pueden descomponer en otras sustancias más sencillas. Ejemplos: agua (H₂O), amoníaco (NH₃), glucosa (C₆H₁₂O₆), ... Hay más de 2.10⁶ compuestos orgánicos y más de 40 000 inorgánicos.

2. MASA ATÓMICA, MASA MOLECULAR, MOL

Como la masa de un átomo y su tamaño son extraordinariamente pequeños, se emplea, como unidad de masa la masa de un átomo, la **unidad de masa atómica** (uma o u) es la 1/12 parte de la masa de un átomo de ¹²C.

$$1u = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ Kg}$$

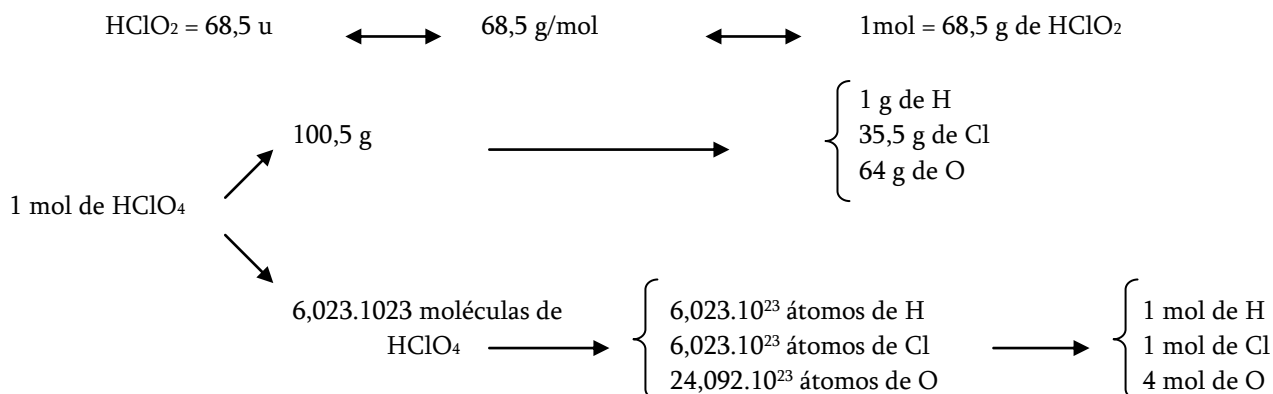
- Masa atómica** (de un elemento): es la masa de un átomo expresada en uma, es decir, el número de veces que la masa de uno de los átomos contiene la 1/12 parte de la masa del átomo de ¹²C.
- Masa molecular**: es la masa de una molécula expresada en uma, y resulta de la suma de las masas de los átomos que la forman.

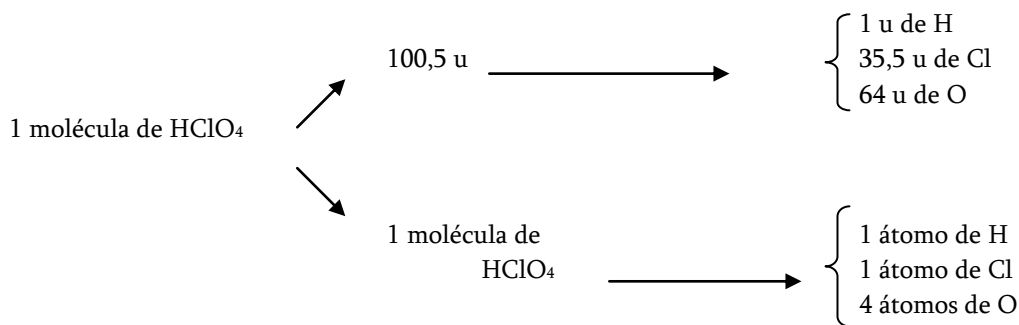
$$\text{Ej: } M_m(\text{HClO}_2) = 1 + 35,5 + (2 \cdot 16) = 68,5 \text{ u}$$

En la tabla periódica aparecen los valores de las masas atómicas de los distintos elementos en función de la abundancia de sus isótopos y de la masa de estos isótopos.

- Mol**: es la cantidad de una sustancia que contiene tantas unidades elementales como átomos hay en 0,012 Kg de ¹²C. Esta cantidad es 6,023.10²³ y se denomina número de Avogadro (constante de Avogadro).

La masa de un mol de cualquier sustancia, expresada en gramos, coincide con el valor numérico de su masa molecular expresada en uma.





3. COMPOSICIÓN CENTESIMAL DE UN COMPUESTO.

Indica el porcentaje en peso en que interviene cada elemento en la constitución de una sustancia.

Ejemplo:

Calcula la composición centesimal del etanol (CH₃CH₂OH)

$$M_m = 46 \text{ u} = 46 \text{ g/mol}$$

$$\% C = \frac{24}{46} \cdot 100\% = 52,17\%$$

$$\% O = \frac{16}{46} \cdot 100\% = 34,78\%$$

$$\% H = \frac{6}{46} \cdot 100\% = 13,04\%$$

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

Cuando se conocen las cantidades de cada elemento en un compuesto en forma de porcentaje, se puede calcular la fórmula empírica de ese compuesto. Para ello:

- Convertir la cantidad de cada elemento en gramos y calcular el número de moles de ese elemento que hay, al dividirlo entre las respectivas masas atómicas.
- Dividir el número de moles de cada elemento por el más pequeño para obtener números, y si no resultan números enteros se multiplican por números enteros sencillos: 2, 3, 4, ...
- Para conocer la fórmula molecular del compuesto necesitamos conocer la masa molecular del compuesto. La fórmula molecular será un múltiplo de la fórmula empírica.

Ejemplo:

Un ácido orgánico está formado por 54,53% de C, un 9,15% de H y un 36,32% de O. Su masa molecular es 88,1072 u. Calcula la fórmula empírica y la fórmula molecular.

$$54,53\% \text{ de C} \rightarrow 54,53 \text{ g de C} \rightarrow C = \frac{54,53}{12} = 4,54 \text{ mol} \rightarrow \frac{4,54}{2,27} = 2$$

$$9,15\% \text{ de H} \rightarrow 9,15 \text{ g de H} \rightarrow H = \frac{9,15}{1} = 9,15 \text{ mol} \rightarrow \frac{9,15}{2,27} = 4$$

$$36,32\% \text{ de O} \rightarrow 36,32 \text{ g de O} \rightarrow C = \frac{36,32}{16} = 2,27 \text{ mol} \rightarrow \frac{2,27}{2,27} = 1$$

Fórmula empírica
C₂H₄O

$$M_m(\text{C}_2\text{H}_4\text{O}) = 44 \text{ u}$$

$$\begin{aligned} \text{Fórmula molecular} &= n \cdot \text{Fórmula empírica} \\ 88,1072 &= n \cdot 44 \\ n &= 2 \end{aligned}$$

Fórmula molecular
C₄H₈O₂

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

Una mezcla es la combinación de 2 o más sustancias puras en proporción variable y cuyos componentes se pueden separar por procedimientos físicos. Pueden ser:

- Mezclas **heterogéneas**: resultan de la interposición de varias sustancias que se distinguen unas de otras a simple vista o con el microscopio. Los componentes de la mezcla conservan todas sus propiedades físicas y químicas.
Ej: granito, S + Fe, aceite y agua, arroz y azúcar, ...
- Mezclas **homogéneas**: resultan de la interposición de varias sustancias pero sus componentes no se distinguen a simple vista o con el microscopio. Las propiedades son las mismas en toda la mezcla. Ej: aire, ácido clorhídrico, agua + alcohol ... Se las llama disoluciones.

		disolvente		
		Sólido	Líquido	Gas
Soluto	Sólido	Aleaciones	Sal + agua	Humos
	Líquido	Amalgamas	Metanol + agua	Nieblas
	gas	Platino + H ₂	HCl + agua	Aire

Se denomina:

- Soluto: al componente que está en menor proporción (generalmente)
- Disolvente: al componente que está en mayor proporción.
Siempre que uno de los componentes sea el agua, esta será el disolvente, independientemente de las cantidades.

6. FORMAS DE EXPRESAR LA CONCENTRACIÓN DE LAS DISOLUCIONES.

En función de la cantidad de soluto y de disolvente, las disoluciones se clasifican como:

- **Diluidas**: cuando la cantidad de soluto es pequeña respecto a la de disolvente.
- **Concentradas**: la cantidad de soluto es grande.
- **Saturadas**: el disolvente contiene la máxima cantidad de soluto que puede disolver a esa temperatura.
Si se añade más soluto se va hacia el fondo y entonces es una disolución **sobresaturada**.

La concentración es la cantidad de soluto que hay en una determinada cantidad de disolvente o de disolución. Existen los siguientes modos de expresar la concentración:

- a) **Porcentaje en peso o porcentaje en masa (%)**: indica los gramos de soluto que hay en 100g de disolución.

$$\% = \frac{m \text{ soluto}}{m \text{ disolución}} \cdot 100$$

ej: HCl 20%

El porcentaje en volumen indicará los mL de soluto que hay en 100mL de disolución. Por ejemplo en las bebidas alcohólicas: 40º, 20º, ...

- b) **Concentración en masa (g/L)**: indica la masa de soluto que hay en un volumen de disolución.

$$\frac{g}{L} = \frac{m \text{ soluto}}{V(L) \text{ disolución}}$$

ej: NaCl 30 g/L

- c) **Molaridad (M)**: es el número de moles de soluto que hay en un litro de disolución.

$$M = \frac{n^\circ \text{ de moles de soluto}}{V(L) \text{ disolución}}$$

$$n^\circ \text{ moles} = \frac{m}{Mm}$$

d) **Molalidad (m)**: es el número de moles de soluto que hay en un kilogramo de disolvente.

$$m = \frac{n^\circ \text{ de moles de soluto}}{m \text{ (Kg) de disolvente}}$$

e) **Fracción molar (X)**: es el cociente entre el número de moles de un componente y el número de moles totales de la disolución.

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

$$\sum X_i = 1$$

Ejercicio 1:

Se disuelven 5 g de HCl en 35 g de H₂O. La densidad de la disolución resultante es 1,06 g/mL. Halla la concentración de la disolución en: a) %, b) g/L, c) M, d) m, e) X

Ejercicio 2:

En la etiqueta de un frasco de H₂SO₄ se tienen los siguientes datos: densidad 1,84 g/mL y riqueza en peso 96%. Calcula la concentración del ácido y exprésala en M, m y Xs

7. LEYES DE LOS GASES.

Los gases no tienen ni forma ni volumen propios y tienden a expandirse ocupando todo el recipiente que los contiene. Las moléculas que forman los gases se mueven al azar en todas direcciones y sentidos. Hay dos tipos de gases:

- Gases **ideales**: se caracterizan porque no hay fuerzas de atracción entre sus moléculas y el volumen de estas moléculas es despreciable frente al volumen total ocupado por el gas.
- Gases **reales**: se aproximan al comportamiento real cuando la presión es baja y la temperatura es alta. En condiciones ambientales (condiciones estándar, 1 atm y 25 °C) se considerarán gases ideales; pero a presiones altas y temperaturas bajas aparecen fuerzas de atracción entre moléculas y el comportamiento se desvía del ideal.

Los ideales cumplen una serie de leyes:

a) **Ley de AVOGADRO.**

“Volúmenes iguales de diferentes gases en las mismas condiciones de P y T tienen el mismo número de moléculas”

(P = cte y T = cte) → V = k₁ · n

en una mezcla de gases

$$\% \text{ volumen} = \text{fracción molar} \cdot 100\%$$

b) **Ley de BOYLE-MARIOTTE.**

“A temperatura constante, el volumen ocupado por un gas es inversamente proporcional a la presión a la que está sometido”

(T = cte) P = $\frac{k_2}{V}$ →

$$P_1 \cdot V_1 = P_2 \cdot V_2$$

c) **Ley de CHARLES Y GAY- LUSSAC.**

“A presión constante, el volumen ocupado por un gas es directamente proporcional a la temperatura absoluta a la que se encuentra”

$$(P = \text{cte}) \quad V = k_3 \cdot T \quad \rightarrow \quad \boxed{\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2}}$$

d) **ECUACIÓN GENERAL de los gases ideales.**

Supongamos que un gas está a P_0 , T_0 y V_0 . Le sometemos a dos transformaciones: una a $T = \text{cte}$ (Ley de Boyle) y otra a $P = \text{cte}$ (Ley de Charles y Gay-Lussac)

$$\begin{array}{ccc} \boxed{\begin{array}{c} P_0 \\ V_0 \\ T_0 \end{array}} & \xrightarrow{T=\text{cte (Boyle)}} & \boxed{\begin{array}{c} P \\ V' \\ T_0 \end{array}} & \xrightarrow{P=\text{cte(Charles y ...)}} & \boxed{\begin{array}{c} P \\ V \\ T \end{array}} \end{array}$$

$$P_0 \cdot V_0 = P \cdot V' \quad \frac{V'}{T_0} = \frac{V}{T}$$

$$\underbrace{\hspace{15em}}$$

$$P_0 \cdot V_0 = \frac{P \cdot V \cdot T_0}{T} \quad \rightarrow \quad \boxed{\frac{P_0 \cdot V_0}{T_0} = \frac{P \cdot V}{T}}$$

e) **ECUACIÓN DE ESTADO de los gases ideales.**

Si tenemos 1 mol de 1 gas en CN (1 atm y 273 K), como 1 mol de un gas ocupa 22,4 L, de la ecuación general se deduce que:

$$\frac{P_0 \cdot V_0}{T_0} = \frac{1 \text{ atm} \cdot 22,4 \text{ L}}{273 \text{ K}} = 0,082 \frac{\text{atm} \cdot \text{L}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

$$\frac{P \cdot V}{T} = R \quad \rightarrow \quad \boxed{P \cdot V = n \cdot R \cdot T}$$

La ecuación de estado nos permite calcular la masa molecular y la densidad de un gas. Así:

$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T = \frac{m}{Mm} \cdot R \cdot T \quad \rightarrow \quad Mm = \frac{m \cdot R \cdot T}{P \cdot V} \quad \rightarrow \quad \boxed{Mm = \frac{\rho \cdot R \cdot T}{P}} \quad \rightarrow \quad \boxed{\rho = \frac{P \cdot Mm}{R \cdot T}}$$

La densidad relativa de un gas es el cociente entre las densidades de esos gases a la misma P y T.

$$\left. \begin{array}{l} \rho_A = \frac{P \cdot Mm_A}{R \cdot T} \\ \rho_B = \frac{P \cdot Mm_B}{R \cdot T} \end{array} \right\} \quad \boxed{\frac{\rho_A}{\rho_B} = \frac{\frac{P \cdot Mm_A}{R \cdot T}}{\frac{P \cdot Mm_B}{R \cdot T}} = \frac{Mm_A}{Mm_B}}$$

f) **Ley de DALTON de las presiones parciales.**

Si tenemos un recipiente con varios gases (1,2,3,...) cada componente de la mezcla gaseosa ejerce una presión parcial igual que la que ejercería si ocupase él sólo todo el volumen del recipiente, y la **presión total** de la mezcla es la suma de las presiones parciales de los gases que la forman.

$$P_T = P_1 + P_2 + P_3 + \dots = \sum P_i$$

$$P_1 \cdot V = n_1 \cdot R \cdot T \quad + \quad P_2 \cdot V = n_2 \cdot R \cdot T \quad + \quad P_3 \cdot V = n_3 \cdot R \cdot T$$

$$(P_1 + P_2 + P_3 + \dots) \cdot V = (n_1 + n_2 + n_3 + \dots) \cdot R \cdot T \quad \rightarrow \quad P_T \cdot V = n_T \cdot R \cdot T$$

Si se dividen las ecuaciones correspondientes a cada gas por esta única ecuación:

$$\frac{P_1 \cdot V}{P_T \cdot V} = \frac{n_1 \cdot R \cdot T}{n_T \cdot R \cdot T} \quad \longrightarrow \quad \frac{P_1}{P_T} = \frac{n_1}{n_T} = X_1 \quad X_1 = \text{fracción molar del gas 1}$$

Para cualquier componente gaseoso "i" se tiene que: "la presión parcial que ejerce un gas en una mezcla gaseosa es igual a la fracción molar por la presión total".

$$P_i = X_i \cdot P_T$$

Ejercicio 3:

Una muestra de gas oxígeno contenida en un recipiente de 1 L ejerce una presión de 800 mm Hg a 25 °C. En otro recipiente de 3 L, una muestra de gas nitrógeno ejerce una presión de 1,5 atm a 50 °C. Se mezclan las dos muestras metiéndolas en un recipiente de 9 L a 40 °C. Calcula al final: a) La presión parcial de cada gas. B) La presión total. C) La composición volumétrica de la muestra.

#GASES RECOGIDOS SOBRE AGUA

A veces los gases se recogen por desplazamiento en agua y quedan saturados de vapor de agua. De esta forma:

$$P_T = P_v(H_2O) + P_{gas\ seco}$$

P_T: presión total del gas húmedo (saturado con vapor de agua)

P_v(H₂O): presión del vapor de agua

P_{gas seco}: presión del gas seco

Ejercicio 4:

Si se recogen 85 mL de gas oxígeno a 23 °C y 770 mm Hg, calcula el volumen que ocuparía el oxígeno seco en CN.
Dato: P_v(H₂O) a 23 °C = 21,1 mm Hg.

8. DETERMINACIÓN DE LA MASA MOLECULAR DE UN GAS A PARTIR DE LA ECUACIÓN DE ESTADO.

A partir de la ecuación de estado se puede calcular la masa molecular de cualquier gas. (Ver apartados 4 y 7).

Ejercicio 4:

Una sustancia orgánica contiene sólo C, H y O. A 250 °C y 750 mm Hg, 1,65 g de dicha sustancia en forma de vapor ocupan 629 mL. Si su análisis elemental es el siguiente: 63,1% C y 8,7% H, calcula su fórmula molecular.

9. REACCIÓN QUÍMICA. ECUACIÓN QUÍMICA.

Una reacción química se representa mediante una ecuación química, en la cual a la izquierda se escriben los reactivos y a la derecha los productos, separados por una flecha (que indica el sentido de la reacción). En algunos casos se especifica el estado físico de las sustancias que intervienen en ella: sólido (s), líquido (l), gaseoso (g) y disolución acuosa (ac) o (aq).

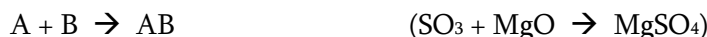
Para que una ecuación cumpla la ley de la conservación de la masa es imprescindible que esté ajustada o igualada, es decir, que haya el mismo número de átomos de cada elemento en los dos miembros de la ecuación. Para ajustar se emplean los coeficientes estequiométricos (números), que se pueden leer como moles, moléculas o volúmenes de gases.

Por ejemplo:

	N_2 (g)	+ 3	H_2 (g)	\rightarrow	2	NH_3 (g)
Moles	1		3			2
Moléculas	1		3			2
Volúmenes	1		3			2
Gramos	1. (28)		3.(2)			2.(17)

#En función del reordenamiento de los átomos, las reacciones se pueden clasificar como:

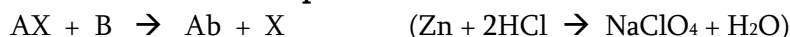
a) Reacciones de **síntesis, formación** o combinación: se forma una sustancia a partir de otras más simples.



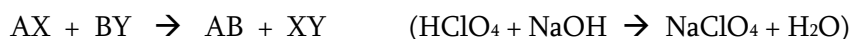
b) Reacciones de **descomposición**: una sustancia se descompone en dos o más que son más simples.



c) Reacciones de **sustitución o desplazamiento**: unos átomos son sustituidos por otros.



d) Reacciones de **doble sustitución** o de intercambio: se intercambian átomos entre dos compuestos.



10. CÁLCULOS ESTEQUIOMÉTRICOS.

10.1. REACTIVO LIMITANTE Y REACTIVO EN EXCESO.

El reactivo **limitante** es el reactivo que está en menor proporción que la estequiometría y por tanto es el que se agota en primer lugar y hace que se pare la reacción. El reactivo o reactivos que no se consumen totalmente están en **exceso**.

Ejercicio 5:

El fósforo reacciona con bromo para dar tribromuro de fósforo. Si se hacen reaccionar 50 g de fósforo con 200 g de bromuro: a) ¿Cuánto tribromuro de fósforo obtendremos?. b) ¿Qué sustancia en exceso?

10.2. REACCIONES EN LAS QUE PARTICIPAN GASES Y/O SUSTANCIAS EN DISOLUCIÓN.

Cuando intervienen gases las cantidades se expresan en volúmenes si todos se encuentran en las mismas condiciones de P y T. Si hay reacciones en disolución, sólo reacciona el soluto y no reacciona el disolvente.

Ejercicio 6:

Una disolución de H_2SO_4 del 44% en peso tiene una densidad de 1,343 g/mL. 25 mL de esa disolución se ponen en contacto con Zn metálico en exceso, obteniéndose como productos de la reacción hidrógeno y sulfato de zinc. Calcula el volumen de hidrógeno que se obtiene a 20 °C y 740 mm Hg.

10.3. REACTIVOS CON UN DETERMINADO GRADO DE PUREZA. RENDIMIENTO DE UNA REACCIÓN.

Quando hay reactivos que no son puros se debe calcular la cantidad de reactivo puro del que se dispone y que es el que interviene realmente en la reacción:

$$\% \text{ pureza} = \frac{m \text{ reactivo puro}}{m \text{ total del reactivo (impuro)}} \cdot 100\%$$

El rendimiento de una reacción (η) es el cociente entre la cantidad real obtenida y la cantidad teórica que debería obtenerse si el rendimiento fuese del 100%:

$$\eta = \frac{\text{cantidad obtenida}}{\text{cantidad teórica}} \cdot 100\%$$

Ejercicio 7:

Se hace reaccionar 11,1 g de sosa comercial del 90% de pureza con HCl y se produce cloruro de sodio y agua. Calcula: a) La cantidad de cloruro de sodio producido. b) Si se obtuvieron 9,02 g, ¿cuál es el rendimiento de la reacción?