

CAPÍTULO 4

ESTEQUIOMETRÍA

Objetivos del capítulo:

Interpretar física y matemáticamente la relación de combinación de reactivos y productos

Identificar los tipos de reacciones químicas posibles

Introducción

La Estequiometría es la parte de la química que se refiere a la determinación de las masas de combinación de las sustancias en una reacción química, hace referencia al número relativo de átomos de varios elementos encontrados en una sustancia química y a menudo resulta útil en la calificación de una reacción química, en otras palabras se puede definir como la parte de la Química que trata sobre las relaciones cuantitativas entre los elementos y los compuestos en reacciones químicas.

Estequiometría

Es el cálculo de las relaciones cuantitativas entre reactantes o, también conocidos como reactivos, y productos en el transcurso de una reacción química. Estas relaciones se pueden deducir a partir de la teoría atómica. La estequiometría es la ciencia que mide las proporciones cuantitativas o relaciones de masa de los elementos químicos que están implicados.

Principio

En una reacción química se observa una modificación de las sustancias presentes: los reactivos se consumen para dar lugar a los productos.

A escala microscópica, la reacción química es una modificación de los enlaces entre átomos, por desplazamientos de electrones: unos enlaces se rompen y otros se forman, pero los átomos implicados se conservan. Esto es lo que llamamos la ley de conservación de la masa, que implica las dos leyes siguientes:

- la conservación del número de átomos de cada elemento químico
- la conservación de la carga total

Las relaciones estequiométricas entre las cantidades de reactivos consumidos y productos formados dependen directamente de estas leyes de conservación, y están determinadas por la ecuación (ajustada) de la reacción.

MOL

Es uno de los más importantes en la química. Su comprensión y aplicación son básicas en la comprensión de otros temas. Es una parte fundamental del lenguaje de la química. 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. Cuando hablamos de un mol, hablamos de un número específico de materia. Por ejemplo, si mencionamos una docena, esto implica 12, unidades, una centena 100 y un mol equivale a 6.022×10^{23} . Este número se conoce como Número de Avogadro y es un número tan grande que es difícil imaginarlo para elementos macrocópicos.

Un mol de azufre, contiene el mismo número de átomos que un mol de plata, el mismo número de átomos que un mol de calcio, y el mismo número de átomos que un mol de cualquier otro elemento.

$$1 \text{ MOL de un elemento} = 6.022 \times 10^{23} \text{ átomos}$$

Si comparamos una docena de bolitas de vidrio y una docena de pelotas de ping-pong, el número de bolitas y pelotas es el mismo, pero ¿pesan lo mismo? NO. Así pasa con las moles de átomos, son el mismo número de átomos, pero la masa depende del elemento y está dada por la masa atómica del mismo.

Para cualquier ELEMENTO:

$$1 \text{ MOL} = 6.022 \times 10^{23} \text{ ÁTOMOS} = \text{MASA ATÓMICA (gramos)}$$

Ejemplos:

Moles	Átomos	Gramos(Masa atómica)
1 mol de S	6.022×10^{23} átomos de S	32.06 g de S
1 mol de Cu	6.022×10^{23} átomos de Cu	63.55 g de Cu
1 mol de N	6.022×10^{23} átomos de N	14.01 g de N
1 mol de Hg	6.022×10^{23} átomos de Hg	200.59 g de Hg
2 moles de K	1.2044×10^{24} átomos de K	78.20 g de K
0.5 moles de P	3.0110×10^{23} átomos de P	15.485 g de P



En base a la relación que establecimos entre moles, átomos y masa atómica para cualquier elemento, podemos nosotros convertir de una otra unidad utilizando factores de conversión. Ejemplos:

¿Cuántas moles de hierro representan 25.0 g de hierro (Fe)? Necesitamos convertir gramos de Fe a moles de Fe. Buscamos la masa atómica del Fe y vemos que es 55.85 g. Utilizamos el factor de conversión apropiado para obtener moles.

25.0 g Fe	(1 mol 55.85 g)	= 0.448 moles Fe	La unidad del dato y del denominador del factor de conversión debe ser la misma
-----------	---	---------------	---	------------------	---

Volumen molar de un gas en condiciones normales

En ciertas ocasiones de presión y temperatura, es posible que la mayoría de las sustancias existan en alguno de los tres estados de la materia: sólido, líquido y gaseoso. Por ejemplo, el agua puede estar en estado sólido como hielo, en estado líquido como en agua o en estado gaseoso como vapor. Las propiedades físicas de una sustancia dependen a menudo de su estado.

Los gases son en diversos aspectos mucho más sencillos que los líquidos y los sólidos. El movimiento molecular de los gases resulta totalmente aleatorio, y las fuerzas de atracción entre sus moléculas son tan pequeñas que una se mueve en forma libre y fundamentalmente independiente de las otras. Sujetos a cambios de temperatura y presión, los gases se comportan en forma más previsible que los sólidos y los líquidos. Las leyes que norman este comportamiento han desempeñado una importante función en el desarrollo de la teoría atómica de la materia y la teoría cinética molecular de los gases.

De acuerdo con lo anterior se deduce que el volumen molar de un gas, que es el volumen ocupado por un mol de cualquier gas en condiciones normales de presión y temperatura.

Las condiciones de 0°C (273.15 K) Y 1 atm (760 mm de Hg) se denominan temperatura y presión estándar y, a menudo se abrevian TPE o CNPT

Es decir, un mol de cualquier gas, en condiciones normales, ocupa siempre el mismo volumen; este volumen es el volumen molar y es 22,4 litros

Lo anterior se determinó a través de experimentos como el siguiente: Un gas, como el Hidrógeno cuya densidad es de 0.09 gramos por litro y su masa molecular es de 2.016 gramos, el cociente de 2.016 entre 0.09 gramos por litro resulta 22.4 litros.

Al igual que muchas otros acuerdos internacionales en la ciencia, la IUPAC (en química) entre otras organizaciones recomendaron el uso de este par de medidas como condición estándar.



Para el caso de gases a mayores volúmenes, se utiliza el Nm³, que es el equivalente de 1 m³ (1000L) de volumen de un gas, pero medido en CNPT, es por eso que un gas puede ser comprimido aumentando su masa almacenada pero no su volumen, por ejemplo si se almacena a alta presión en un tanque o recipiente sometido a alta presión.

APLICACIONES

Las principales aplicaciones de volumen molar de un gas es que resulta muy útil para determinar la masa molar de un gas o de sustancias que se pueden evaporar con cierta facilidad. Si conocemos el volumen y la masa de un gas en condiciones normales, podemos conocer la masa molar de dicho gas. Además, la densidad de un gas la podemos conocer gracias a la división de la masa molar de un gas por su volumen molar.

Un ejemplo son los globos meteorológicos que son lanzados a diario desde las estaciones meteorológicas en todo el país. Los globos empiezan a cierta presión, temperatura y volumen, pero una vez que suben, esas tres variables van cambiando en relación al entorno.

Al poner aire en una cubierta de automóvil, o en una pelota, la presión se incrementa añadiendo más aire (moléculas), por que el volumen se mantiene igual.

Cálculo del volumen molar del gas (VM)

Vg = volumen de gas recogido (se mide en la experiencia)

mO₂ = masa de oxígeno liberado (se mide en la experiencia).

Ejemplo:

- ¿Qué volumen ocupan 30 gramos de gas nitrógeno: N₂, a cero grados centígrados y una atmósfera de presión? Masa atómica del nitrógeno = 14,0067.

Haciendo la regla de tres:

$$\begin{array}{l} 2 \cdot 14,0067 \text{ gramos de nitrógeno} \longrightarrow 1 \text{ mol} = 22,4 \text{ litros} \\ 30 \text{ gramos de nitrógeno} \longrightarrow x \text{ litros} \end{array}$$

Despejando x:

$$x = \frac{22,4 \text{ litros} \cdot 30 \text{ gramos de nitrógeno}}{2 \cdot 14,0067 \text{ gramos de nitrógeno}}$$

Realizadas las operaciones da como resultado:

$$x = 23,99 \text{ litros}$$



Que es el volumen ocupado por 30 gramos de nitrógeno a cero grados centígrados y una atmósfera de presión.

¿Cuánto pesan 50 litros de gas oxígeno O₂, a cero grados centígrados y una atmósfera de presión?

Masa atómica del oxígeno = 15,9994.

Por regla de tres tenemos que:

$$\begin{array}{l} 1 \text{ mol} = 22,4 \text{ litros} \longrightarrow 2 \cdot 15,9994 \text{ gramos de oxígeno} \\ 50 \text{ litros} \longrightarrow x \text{ gramos de oxígeno} \end{array}$$

Despejando x:

$$x = \frac{2 \cdot 15,9994 \text{ gramos de oxígeno} \cdot 50 \text{ litros}}{22,4 \text{ litros}}$$

Realizadas las operaciones da como resultado:

$$x = 71,43 \text{ gramos de oxígeno}$$

Que es el peso en gramos de 50 litros de oxígeno en condiciones normales: cero grados Celsius y una atmósfera de presión.

Las Reacciones Químicas

Las reacciones químicas son procesos en los que una o más sustancias se transforman en otra u otras con propiedades diferentes. Para que pueda existir una reacción química debe haber sustancias que reaccionan y sustancias que se forman. Se denominará reaccionante o reactivo a la sustancia química que reacciona. A las sustancias que se generan debido a una reacción química se les denomina sustancia resultante o producto químico. Los cambios químicos alteran la estructura interna de las sustancias reaccionantes.

Generalmente, se puede decir que ha ocurrido una reacción si se observa que al interactuar los "supuestos" reaccionantes se da la formación de un precipitado, algún cambio de temperatura, formación de algún gas, cambio de olor o cambio de color durante la reacción.

A fin de expresar matemática una reacción química se hace necesario utilizar una expresión en la cual se señalan los reactivos y los productos. Esta expresión recibe el nombre de ecuación química.

Existen cuatro tipos de reacciones:

- a) Combinación
- b) Descomposición
- c) Desplazamiento



d) Doble combinación

Las reacciones también pueden ser clasificadas en

a) Reacción química homogénea

b) Reacción química heterogénea.

El estudio de la rapidez con la que se efectúa una reacción química, consumiendo reaccionantes químicos y liberando productos químicos, se denomina cinética química. Se puede expresar la rapidez de reacción como la relación que se presenta entre la masa de reaccionante consumida y tiempo que dura la reacción. También se puede tomar la rapidez de reacción como la relación existente entre la masa formada de producto y el tiempo de reacción.

Existen varios factores que puede acelerar la rapidez de la reacción química. Por ejemplo, si la concentración de los reaccionantes aumenta, esto traerá como consecuencia que se incremente la rapidez de la reacción química. De forma parecida si la superficie de contacto entre los reaccionantes aumenta, también se verá un efecto de aumento de la velocidad de reacción química. Otro factor que incrementa la rapidez de la reacción química es el cambio de la temperatura. Los catalizadores positivos y los catalizadores negativos también incidirán en el aumento o la disminución de la rapidez de la reacción química.

Reacciones de óxido - reducción

Las reacciones de óxido - reducción o REDOX son aquellas donde está involucrado un cambio en el número de electrones asociado a un átomo determinado, cuando este átomo o el compuesto del cual forma parte se transforma desde un estado inicial a otro final.

La gran mayoría de las reacciones redox ocurren con liberación de energía. Por ejemplo: la combustión de compuestos orgánicos que proporciona energía calórica, las reacciones que se realizan en una pila o batería, donde la energía química es transformada en energía eléctrica, y las reacciones más importantes, desde el punto de vista de nuestro curso, que ocurren a nivel del metabolismo de un ser viviente. Como los alimentos son sustancias reducidas, el organismo las oxidada controladamente, liberando energía en forma gradual y de acuerdo a sus requerimientos. Esta energía es transformada en energía química en forma de ATP, la cual es utilizada para todos los procesos endergónicos que ocurren en los organismos.

Un átomo neutro cualquiera tiene un número definido de electrones, el cual corresponde al número de protones que posee su núcleo; es decir, tiene tantos electrones como el valor de su número atómico.

Por ejemplo:

H $Z = 1$; es decir 1 protón y 1 electrón

Na $Z = 11$; es decir 11 protones y 11 electrones

I $Z = 53$; es decir 53 protones y 53 electrones



Generalmente, cuando un elemento determinado se combina a través de una reacción química, el número de electrones que está asociado a él, puede ser mayor o menor que su número atómico característico. De aquí nace el concepto de estado de oxidación o número de oxidación. Lo que simplemente significa, el número de electrones en exceso o de déficit que se le asigna a un elemento con respecto a su número atómico, cuando forma parte de un compuesto o está en forma de ión, siguiendo ciertas reglas:

1. Si el número de electrones asignado a un elemento es mayor que su número atómico, se le confiere una carga formal negativa. Por el contrario, si el número de electrones asignado es menor que su número atómico, se le otorga una carga formal positiva.

Basado en el ejemplo anterior:

$H^+ Z = 1$; 1 protón y 0 electrón N° Oxid. = +1

$Na^+ Z = 11$; 11 protones y 10 electrones N° Oxid. = +1

$I^- Z = 53$; 53 protones y 54 electrones N° Oxid. = -1

2. En los elementos libres o compuestos formados por un mismo tipo de átomos, el número de oxidación de todos ellos es cero. Por ejemplo: Na, H₂, S₈, P₄. Todos ellos tienen N° de oxidación = 0.

3. En los iones simples (constituidos por un sólo tipo de átomos), el N° de oxidación es igual a la carga del ión. Por ejemplo: Al⁺⁺⁺, su N° de oxidación es +3; Fe⁺⁺, su N° de oxidación es +2; Fe⁺⁺⁺, su N° de oxidación es +3.

4. El N° de oxidación del oxígeno es generalmente -2, cuando forma parte de un compuesto; excepto en los siguientes casos:

- Cuando forma parte de compuestos llamados peróxidos, donde hay enlace O-O. En este caso el N° de oxidación asignado para el oxígeno es -1.
- Cuando el oxígeno se combina con flúor (elemento más electronegativo que el oxígeno), el N° de oxidación asignado para el oxígeno es +2.

5. El N° de oxidación asignado para el hidrógeno es +1 en la mayoría de los compuestos. La única excepción es en los hidruros, donde el hidrógeno se une a elementos menos electronegativos que él. Por ejemplo: hidruro de sodio (NaH), en estos casos el N° de oxidación asignado para el hidrógeno es -1.

6. Los N° de oxidación de los diferentes elementos que conforman una molécula deben coincidir con la carga total de esa molécula. Es decir, la suma de los N° de oxidación de los diferentes átomos que la constituye debe ser igual a la carga total de la molécula. De aquí podemos deducir lo siguiente:

- En las moléculas neutras, la suma de los N° de oxidación de los átomos que la forman debe ser igual a cero. Por ejemplo, H₂O, el N° de oxidación del H es +1, como hay dos H, contribuye a la molécula con carga +2. El N° de oxidación del O es -2 y la molécula contiene sólo un O; por lo tanto la suma de +2 + (-2) = 0, que corresponde a la carga de una molécula neutra.



En muchos casos el valor del N° de oxidación corresponde a la valencia de un elemento, pero son conceptos diferentes. Valencia de un elemento es el número de enlaces simples que puede formar un átomo; o bien, el número de átomos de hidrógeno con que puede combinarse; es un número absoluto, no hay un signo asociado a él. En cambio, el número de oxidación representa la carga aparente que tiene un átomo en un compuesto dado y corresponde a un mayor o menor número de electrones asociado a él, según las reglas mencionadas anteriormente. Este número puede ser positivo o negativo, dependiendo de la electronegatividad del átomo en particular. Por ejemplo, H₂O, la valencia del oxígeno es 2 y su N° de oxidación es -2; En el óxido de flúor, F₂O, la valencia del oxígeno es 2 y su N° de oxidación es +2, porque el flúor es más electronegativo que el oxígeno, entonces se le asigna 1 electrón más a cada flúor con respecto a su N° atómico y el oxígeno queda deficiente de esos 2 electrones. El átomo de sodio (Na, cuyo valor de Z = 11) es neutro y tiene un electrón (1 e-) en su último orbital (estado inicial).

La pérdida de 1 e- se llama oxidación. Una semirreacción de oxidación está siempre acompañada por una disminución en el N° de electrones del elemento que está siendo oxidado. La disminución del N° de electrones asociado con ese átomo, trae como consecuencia un aumento del N° de oxidación (es más positivo).

Los electrones cedidos por los dos átomos de Na se combinan con dos moléculas de H₂O para formar una molécula de H₂ gas y dos iones OH⁻. La ganancia de electrones por los hidrógenos del agua se llama reducción. Una semirreacción de reducción está siempre acompañada por un aumento del N° de electrones asociado con el elemento que está siendo reducido. Hay disminución del N° de oxidación.

Los electrones en una reacción de este tipo, son captados por las especies químicas que se reducen a la misma velocidad con que son cedidos por las especies que se oxidan: es decir, cuando ocurre una oxidación, hay siempre una reducción. Estos son sistemas acoplados, en que ambos procesos se realizan simultáneamente.