

TEMA 1

CÁLCULOS NUMÉRICOS ELEMENTALES EN QUÍMICA

1. Sustancias químicas. Masa atómica, masa molecular, mol.
2. Composición centesimal de un compuesto. Determinación de la fórmula de un compuesto por análisis elemental. Determinación de fórmulas empíricas y moleculares.
3. Mezclas homogéneas: mezclas de gases y disoluciones líquidas. Formas de expresar la concentración de las disoluciones: porcentaje en peso y volumen, masa / volumen, molaridad, molalidad, fracción molar.
4. Comportamiento de los gases en condiciones ideales. Ecuación de estado. Ley de Dalton de las presiones parciales. Determinación de la masa molecular de un gas a partir de los valores de magnitudes relacionadas con la ecuación de estado.
5. Reacción química. Ecuación química. Cálculos estequiométricos: reactivo limitante y reactivo en exceso, reacciones en las que participan gases y/o sustancias en disolución, reactivos con un determinado grado de pureza, rendimiento de una reacción.

1. Sustancias químicas. Masa atómica, masa molecular, mol.

SUSTANCIAS: todos los objetos que nos rodean están formados por sustancias. Cada sustancia tiene propiedades fijas, típicas y medibles para ella.

Si la sustancia es homogénea con propiedades fijas \Rightarrow sustancia pura

MEZCLAS: de sustancias

- Homogéneas: sus componentes no se distinguen no al microscopio
- Heterogéneas: sus componentes se distinguen a simple vista o como mucho al microscopio

Sustancias:

- Homogéneas
 - Puras
 - Elementos: no se pueden descomponer
 - Compuestos: se pueden descomponer
 - Disoluciones
 - Heterogéneas
- } Propiedades fijas
- } Propiedades variables

LEYES PONDERALES

Ley de la conservación de la masa o ley de Lavoisier: en toda reacción química, la suma de las masas de los reactivos es igual a la suma de las masas de los productos.

Ley de las proporciones definidas o ley de Proust: cuando dos o más elementos se combinan para formar un compuesto, lo hacen siempre en una relación de masa constante.

MOL

- Es la unidad en la que se mide la cantidad de sustancia química
- Es la cantidad de sustancia que contiene el mismo número de partículas que átomos hay en 12 gramos exactos del isótopo de carbono 12. \Rightarrow En un mol hay $6,02 \cdot 10^{23}$ partículas. Este número se llama número de Avogadro y se representa por N_A .

$$1 \text{ mol} = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ partículas}$$

Un gas en condiciones normales ($P = 1 \text{ atm}$ y $T = 273 \text{ K}$), un mol de cualquier gas ocupa 22,4 litros:

$$1 \text{ mol gas (c.n.)} \Rightarrow V = 22,4 \text{ L}$$

MASAS ATÓMICAS

Como las masas de los átomos son muy pequeñas, en vez de gramos se usan unidades de masa atómica (uma, u).

$$1 \text{ u} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 1,66 \cdot 10^{-24} \text{ g}$$

$$1 \text{ g} = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ u}$$

La referencia que se emplea es el carbono 12, cuya masa atómica es 12 u. Con respecto a ella se ponen todo el resto de masas.

MASAS MOLECULARES

Masa de una molécula se expresa en u.

Masa de un mol de moléculas es la masa molecular expresada en gramos.

2. Composición centesimal de un compuesto. Determinación de la fórmula de un compuesto por análisis elemental. Determinación de la fórmula empírica y molecular.

Composición centesimal

Ejemplo: FeCl_3 (1 mol pesa $55,8 + (35,5 \cdot 3) = 162,3$ gramos)

$$\begin{array}{l} 162,3 \text{ g} \left\{ \begin{array}{l} 55,8 \text{ g de Fe} \Rightarrow (55,8/162,3) \cdot 100 = 34,38 \% \text{ de Fe} \\ 106,5 \text{ g de Cl} \Rightarrow (106,5/162,3) \cdot 100 = 65,62 \% \text{ de Cl} \end{array} \right. \end{array}$$

La suma de los porcentajes debe dar 100.

A partir de los porcentajes se calcularán las fórmulas empírica y molecular.

Fórmulas

FÓRMULA EMPÍRICA: relación numérica más simple entre los átomos de la molécula.

FÓRMULA MOLECULAR: indica el número real de átomos de la sustancia.

FÓRMULA ESTRUCTURAL O DESARROLLADA: muestra la distribución (disposición) de los átomos, bien escrita o bien dibujada.

Determinación de la fórmula empírica de un compuesto

(a partir de la composición centesimal)

- 1.- Dividimos el % de cada elemento entre la masa atómica del átomo (para así calcular el número de moles).
- 2.- Las cantidades obtenidas se dividen entre la menor de ellas para obtener las relaciones entre ellos.
- 3.- Si los números obtenidos no son enteros, se buscará la forma de lograr que sean números enteros sencillo.

Determinación de la fórmula molecular de un compuesto

Masa de la fórmula molecular = n · Masa de la fórmula empírica

Sabiendo la masa molecular y la masa de la fórmula empírica, se calcula n.
La fórmula empírica y la fórmula molecular pueden coincidir.

Determinación de la composición a partir de la fórmula

- 1.- Se determina la masa molecular o la masa de la fórmula empírica.
- 2.- Se calcula el % de cada elemento en dicha masa.

3. Mezclas homogéneas: mezclas de gases y disoluciones líquidas. **Formas de expresar la concentración de las disoluciones:** **Porcentaje en peso y volumen, masa / volumen, molaridad,** **molalidad, fracción molar**

MEZCLAS	COMPUESTOS
▪ Generadas por cambios físicos	▪ Generadas por cambios químicos
▪ Las propiedades originales permanecen	▪ Presentan propiedades nuevas, distintas de los reactivos
▪ Poseen composiciones variables	▪ Composición y fórmulas definidas
▪ No existe cambio energético en el proceso de mezcla	▪ Existe un cambio energético en el proceso de combinación
▪ Se separan por cambios físicos	▪ Se separan por descomposición (cambio químico)

Formas de expresar la concentración de disoluciones

Porcentaje en peso (masa): $\frac{g(\text{solute})}{g(\text{totales})} 100$

Porcentaje en volumen: $\frac{\text{volumen}(\text{solute})[L]}{\text{volumen}(\text{disolución})[L]} 100$

Masa / Volumen (g/L): $\frac{g(\text{solute})}{L(\text{disolución})}$

Molaridad: $\frac{\text{moles}(\text{solute})}{L(\text{disolución})} = \frac{g(\text{solute}) / Mm(\text{solute})}{L(\text{disolución})}$

Molalidad: $\frac{\text{moles}(\text{solute})}{Kg(\text{disolvente})} = \frac{g(\text{solute}) / Mm(\text{solute})}{Kg(\text{disolvente})}$

Fracción molar de soluto: $\frac{\text{moles}(\text{solute})}{\text{moles}(\text{totales})} = \frac{\text{moles}(\text{solute})}{\text{moles}(\text{solute}) + \text{moles}(\text{disolvente})}$

Fracción molar de disolvente: $\frac{\text{moles}(\text{disolvente})}{\text{moles}(\text{totales})} = \frac{\text{moles}(\text{disolvente})}{\text{moles}(\text{solute}) + \text{moles}(\text{disolvente})}$

4. Comportamiento de los gases en condiciones ideales. Ecuación de estado, Ley de Dalton de las presiones parciales. Determinación de la masa molecular de un gas a partir de los valores de magnitudes relacionadas con la ecuación de estado.

a) Ley de Boyle - Mariotte

$$T = \text{cte} \quad \boxed{P \cdot V = \text{cte}} \Rightarrow P_1 \cdot V_1 = P_2 \cdot V_2$$

b) Ley de Gay – Lussac

$$P = \text{cte} \quad \boxed{V / T = \text{cte}} \Rightarrow V_1 / T_1 = V_2 / T_2$$

c) Ley de Charles

$$V = \text{cte} \quad \boxed{P / T = \text{cte}} \Rightarrow P_1 / T_1 = P_2 / T_2$$

d) Ecuación de Clapeyron o ecuación general de estado de los gases ideales

$$\boxed{P \cdot V / T = \text{cte}} \Rightarrow P_1 \cdot V_1 / T_1 = P_2 \cdot V_2 / T_2$$

En condiciones normales ($P = 1 \text{ atm}$ y $T = 273 \text{ K}$) $\Rightarrow V (1 \text{ mol}) = 22,4 \text{ L}$
 $1 \cdot 22,4 / 273 = 0,082$

$$\boxed{P \cdot V = n \cdot R \cdot T} \quad R = 0,082 \text{ atm L / mol K} \quad \text{ó} \quad 8,31 \text{ J / mol K (S.I.)}$$

e) Ley de las presiones parciales o de Dalton

Cada gas ocupa todo el volumen disponible. Cada gas ejerce una presión (presión parcial).

$$P_i = \frac{n_i RT}{V_T}$$

Dalton supuso que la presión ejercida por cada gas componente de la mezcla era igual a su presión parcial.

Presión parcial sería la presión que ejercería cada gas si él sólo ocupara todo el recipiente.

Dalton supone que la presión total es la suma de todas las presiones parciales:

$$P_T = \sum P_i \Rightarrow P_T = \frac{n_i RT}{V} \Rightarrow R, T, V : \text{ctes} \Rightarrow P_T = \frac{RT}{V} \sum n_i$$

Si divido P_i entre P_T ambos términos:

$$\frac{P_i}{P_T} = \frac{\frac{n_i RT}{V}}{\sum \frac{n_i RT}{V}} \Rightarrow \frac{P_i}{P_T} = \frac{n_i}{\sum n_i} = \frac{n_i}{n_T} = X_i \quad (\sum n_i = n_T; X_i: \text{fracción molar})$$

$$\Rightarrow \frac{P_i}{P_T} = X_i \Rightarrow \boxed{P_i = X_i P_T}$$

f) Humedad relativa

Humedad relativa es el cociente entre la presión parcial del agua en el aire y la máxima presión que puede haber a esa temperatura.

La máxima presión que puede haber a esa temperatura es la presión de vapor del agua a esa temperatura.

$$HR = \frac{P_{\text{Agua}}}{P_{\text{máx(agua)}}} \cdot 100$$

g) Ley de los volúmenes de combinación

5. Reacción química. Ecuación química. Cálculos estequiométricos: reactivo limitante y reactivo en exceso, reacciones en las que participan gases y/o sustancias en disolución, reactivos con un determinado grado de pureza, rendimiento de una reacción.