

1. Formulas químicas. Masas atómica e moleculares. Mol e masa molar.
2. Composición centesimal. Determinación da formula empírica e molecular dun composto.
3. Gases ideais. Ecuación de estado dos gases ideais.
4. Mestura de Gases. Lei de Dalton das presións parciais.
5. Disolucións. Tipos. Solubilidade. Concentración dunha disolución: porcentaxe en masa, porcentaxe en volume, masa de soluto por volume de disolución, molaridade, molalidade e fracción molar.
6. Cómo efectuar cálculos nas reaccións químicas.

1. FORMULAS QUÍMICAS. MASA ATÓMICA E MOLECULAR. MOL E MASA MOLAR.

Desde 1913 sábese que os elementos están formados por átomos quimicamente iguais pero de masa diferente (Isótopos). Os isótopos son átomos dun mesmo elemento químico que teñen igual número atómico pero distinto número másico. Para calcular a masa atómica dun elemento que presente varios isótopos procedese como segue:

- a. Consúltase a masa isotópica, que é a masa de cada un dos isótopos do elemento.
- b. Determinase a abundancia relativa (presenza de cada isótopo, en porcentaxe).

A media ponderada das masas dos distintos isótopos que contén o elemento tómase como a súa masa atómica.

$$\text{Masa atómica (E)} = \frac{A_1 \cdot \%_1 + A_2 \cdot \%_2 + A_3 \cdot \%_3 + \dots}{100}$$

Defínense a **masa atómica relativa dun elemento ou peso atómico** (A_r) como o cociente, entre a masa ponderada do átomo do elemento e a unidade de masa atómica, (símbolo u): doceava parte da masa dun átomo de carbono-12, no seu estado basal, eléctrico e nuclear. O seu valor recomendado é $1,660538921(73) \cdot 10^{-27}$ kg. Así pois, 1 mol de átomos de carbono-12 ten unha masa exacta de 12 **gramos**.

$$1 \text{ mol de C} \cdot \frac{6,023 \cdot 10^{23} \text{ átomos de C}}{1 \text{ mol de C}} \cdot \frac{12 \text{ u}}{1 \text{ átomo de C}} \cdot \frac{1,660 538 921 \cdot 10^{-27} \text{ kg}}{1 \text{ u}} \cdot \frac{10^3 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \cong 12,00 \text{ g de C}$$

Desde 1971 o **mol** é a unidade, no sistema Internacional, da magnitude fundamental **cantidade de substancia**. Defínese como a cantidade de substancia que contén tantas partículas como hai en 12 g de carbono-12. ($6,022 \cdot 10^{23}$). A cantidade de substancia representase pola letra (n) e expresa o número de moles de substancia.

A **masa molar** do carbono -masa de N_A átomos de carbono (1 mol), símbolo $M = 12,00$ g/mol.

A determinación **masa molecular relativa ou peso molecular** (M_r), faise moi doada, basta con obter, na Táboa Periódica, as masas atómicas relativas dos elementos que constitúen a fórmula (molecular, empírica) do composto e sumalas.

Exemplo para o SO_2 :

Masa ponderada do átomo de S $\approx 32,00$ u $\rightarrow 32 \times 1 = 32$ u

Masa ponderada do átomo de O $\approx 16,00$ u $\rightarrow 16 \times 2 = 32$ u

Masa dunha molécula de $\text{SO}_2 = 32 + 32 = 64$ u

A **masa molecular relativa** do SO_2 é: 64 u.

A súa **masa molar** -masa de N_A ($6,02 \cdot 10^{23}$) moléculas de SO_2 (1 mol)- símbolo M :

$$1 \text{ mol de SO}_2 \cdot \frac{6,023 \cdot 10^{23} \text{ moléculas de SO}_2}{1 \text{ mol de SO}_2} \cdot \frac{64 \text{ u}}{1 \text{ molécula de SO}_2} \cdot \frac{1,660 5 \cdot 10^{-24} \text{ g}}{1 \text{ u}} \cong 64,00 \text{ g de SO}_2$$

Entón a masa molar do SO_2 é 64 g/mol.

Outros exemplos:

1 mol de átomos de carbono (C), agrupa a $6,022 \cdot 10^{23}$ átomos, sendo: $A_r = 12 \text{ u}$, e $M = 12 \text{ g}$.

1 mol de átomos de ferro (Fe), agrupa a $6,022 \cdot 10^{23}$ átomos, sendo: $A_r = 55,8 \text{ u}$, e $M = 55,8 \text{ g}$.

1 mol de moléculas nitróxeno (N_2), agrupa a $6,022 \cdot 10^{23}$ moléculas, sendo: $M_r = 28,0 \text{ u}$, e $M = 28,0 \text{ g}$.

1 mol de moléculas auga (H_2O), agrupa a $6,022 \cdot 10^{23}$ moléculas, sendo: $M_r = 18,0 \text{ u}$, e $M = 18,0 \text{ g}$.

.....

A relación que hai, entre a cantidade de substancia (n) e a masa molar (M), ben dada pola expresión:

$$n = \frac{m \text{ (g)}}{M \text{ (g/mol)}}$$

2. COMPOSICIÓN CENTESIMAL. DETERMINACIÓN DA FORMULA EMPÍRICA E MOLECULAR DUN COMPOSTO.

Composición centesimal:

A composición centesimal dun composto é o tanto por cen en masa de cada un dos elementos que o compoñen.

No caso de que o composto estea constituído por moléculas, dividiremos a masa de cada tipo de átomos que compoñen a molécula pola masa molecular e multiplicaremos por cen. Se o composto non está formado por moléculas (se é un cristal...), a composición centesimal a obteremos a partir da súa fórmula empírica do mesmo xeito que lo indicado no parágrafo anterior.

Coñecida a fórmula dun composto a súa composición centesimal pode obterse seguindo o procedemento:

- 1) Determinábase a súa masa molecular.
- 2) A composición centesimal obtense a partir da seguinte relación:

$$\% \text{ do elemento no composto} = \frac{a \cdot A_r}{M_r} \cdot 100$$

Sendo a o número de átomos dun determinado elemento presente na fórmula do composto.

Determinación da fórmula da fórmula empírica e molecular dun composto:

A **fórmula empírica** expresa a proporción relativa dos distintos átomos que constitúen a substancia. É a fórmula máis sinxela.

Para determinar a fórmula empírica dun composto, compre e primeiro lugar, realizar unha análise cuantitativa dos elementos que a forman, o que nos proporcionará a súa composición centesimal.

Coñecida a súa composición centesimal e, utilizando método Cannizzaro, determinase a súa fórmula empírica:

- 1) Divídese a % de cada elemento, pola masa molar M. Obténdose os moles de cada elemento.
- 2) Os moles son proporcionais aos subíndices do átomo correspondente, na fórmula empírica.
- 3) Divídense polo menor e, se non resultan ser todos números naturais, multiplícanse por números sinxelos ata que isto se consiga.

Exemplo:

Supoñamos que a análise elemental dunha substancia determina os seguintes valores: 25,70 % de C; 1,43 % de H e o 50,0 % de Cl. A suma das porcentaxes é 77,13 % e polo tanto a diferenza ata 100 (22,87 %) é osíxeno..

$$\text{En 100 g do composto (C}_a\text{H}_b\text{O}_c\text{Cl}_d\text{)} \quad \left\{ \begin{array}{l} 25,70 \text{ g de C} \\ 1,43 \text{ g de H} \\ 50,0 \text{ g de Cl} \\ 22,87 \text{ g de O} \end{array} \right.$$

Utilizando o correspondente factor de conversión, $\frac{1 \text{ mol Elemento}}{M(\text{g}) \text{ Elemento}}$ obtemos unha cifra que indica o número de moles de cada elemento, en 100 g de composto:

$$\begin{array}{ll} 25,70 \text{ g de C;} & \frac{1 \text{ mol de C}}{12 \text{ g de C}} = 2,14 \text{ mol C;} \quad \frac{2,14 \text{ mol de C}}{1,41} = 1,5 \text{ mol C;} \quad 1,5 \times 2 = 3 \text{ mol C} \\ 1,43 \text{ g de H;} & \frac{1 \text{ mol de H}}{1,0 \text{ g de H}} = 1,43 \text{ mol H;} \quad \frac{1,43 \text{ mol de H}}{1,41} = 1,0 \text{ mol H;} \quad 1,0 \times 2 = 2 \text{ mol H} \\ 50,0 \text{ g de Cl;} & \frac{1 \text{ mol de Cl}}{35,5 \text{ g de Cl}} = 1,41 \text{ mol Cl;} \quad \frac{1,41 \text{ mol de Cl}}{1,41} = 1,0 \text{ mol Cl;} \quad 1,0 \times 2 = 2 \text{ mol Cl} \\ 22,87 \text{ g de O;} & \frac{1 \text{ mol de O}}{16,0 \text{ g de O}} = 1,43 \text{ mol O;} \quad \frac{1,43 \text{ mol de O}}{1,41} = 1,0 \text{ mol O;} \quad 1,0 \times 2 = 2 \text{ mol O} \end{array}$$

Polo tanto, a fórmula empírica do composto será: **C₃H₂O₂Cl₂**

A **fórmula molecular** indica o número exacto de átomos de cada especie existentes na molécula do composto. Pode coincidir coa fórmula empírica ou ser múltiplo dela, é dicir:

$$\text{Fórmula molecular} = n \cdot \text{Fórmula empírica.} \quad \text{onde, } n = 1, 2, 3, 4, \dots \text{etc}$$

O valor de n determínase establecendo o cociente: $n = \frac{\text{masa molecular}}{\text{masa da fórmula empírica}}$

Para medir a masa molecular dun composto utilízase a técnica de espectrometría de masas. Supoñamos que para o exemplo anterior o peso molecular é de 423. O valor de n será:

$$n = \frac{\text{masa molecular}}{\text{masa da fórmula empírica}} = \frac{423}{153} = 3$$

Polo tanto a fórmula molecular será:

$$\text{Fórmula molecular} = n \cdot \text{Fórmula empírica} = 3 \cdot (\text{C}_3\text{H}_2\text{O}_2\text{Cl}_2) = \text{C}_9\text{H}_6\text{O}_6\text{Cl}_6$$

3. GASES IDEAIS. ECUACIÓN DE ESTADO DOS GASES IDEAIS.

Lembremos que os gases ideais son aqueles que cumpren o modelo da teoría atómico molecular. Obedecen as leis de: **Boyle e Mariotte** (A temperatura constante, os volumes ocupados por unha mesma masa gasosa son inversamente proporcionais ás presións que soportan); **Charles** (A presión constante, o volume dunha cantidade constante de gas aumenta proporcionalmente coa temperatura.) e **Gay-Lusac** (A volume constante, a presión á cal está suxeita unha certa cantidade constante de gas aumenta proporcionalmente coa temperatura). Os gases reais aproxímanse ao comportamento ideal cando están sometidos a moi baixa presión, (enrarecidos).

A presión dun gas sobre as paredes do recipiente que o contén, o volume que ocupa, a temperatura á que se encontra e a cantidade de substancia que contén (número de moles) están relacionadas na **Ecuación de estado dos gases ideais**:

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

O valor de **R** (constante dos gases ideais) pode determinarse experimentalmente. Toma distintos valores segundo as unidades nas que se midan P e V :

$$R = 0'082 \text{ atm} \cdot \text{l/K} \cdot \text{mol} = 8'3 \text{ J/K} \cdot \text{mol}$$

Para un determinado número de moles n , a ecuación anterior a podemos escribir:

$$n \cdot R = \text{constante} = \frac{P \cdot V}{T}$$

da que deducimos outra forma de expresar a ecuación, na que están relacionadas as variables de estado para dous estados (1 e 2) diferentes

$$\frac{P_1 V_1}{T_1} = \frac{P_2 V_2}{T_2}$$

4. MESTURA DE GASES. LEI DE DALTON DAS PRESIÓNS PARCIAIS.

En 1793 Dalton (1766-1844) publicou “Observacións e ensaios meteorolóxicos” no que presentaba un estudio experimental sobre as propiedades físicas do aire. No curso desta investigacións realizou unha serie de experimentos con mesturas de gases para determinar como afectaban as propiedades dos gases individuais as propiedades do conxunto e descubriu a lei que se coñece como a **lei das presións parciais**, que se pode enunciar así:

Nunha mestura de gases, a presión total exercida polos mesmos é a suma das presións que cada gas exercería se estivese só nas mesmas condicións».

Se varios gases, A, B e C, que non reaccionan entre si, se poñen nun mesmo recipiente, acaban formando unha **mestura homoxénea** (disolución). Nesa mestura, cada gas distribúese uniformemente por todo o espazo dispoñible, como se ningún outro gas estivese presente. As moléculas exercen a mesma presión sobre as paredes do recipiente que o contén que a que exercerían se non houbo ningún outro gas presente.

A presión que cada gas exerce individualmente denomínase **presión parcial**. A lei de Dalton das presións parciais exprésase:

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

Imos deducir esta lei:

$$P_A \cdot V = n_A \cdot R \cdot T$$

$$P_B \cdot V = n_B \cdot R \cdot T$$

$$P_C \cdot V = n_C \cdot R \cdot T$$

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

$$P_T = \frac{(n_A + n_B + n_C) \cdot R \cdot T}{V} = \frac{n_A \cdot R \cdot T}{V} + \frac{n_B \cdot R \cdot T}{V} + \frac{n_C \cdot R \cdot T}{V} = P_A + P_B + P_C$$

Expresión da presión parcial dun gas en función da fracción molar :

Unha forma de dar a composición química dunha mestura de gases é a través da chamada **fracción molar** (símbolo χ).

$$\chi_i = \frac{n_i}{\sum n_i} = \frac{n_i}{n_T}$$

Para expresar as presións parciais dos tres gases considerados (A, B e C), procedemos do seguinte xeito:

$$P_A = \frac{n_A \cdot R \cdot T}{V} \quad P_B = \frac{n_B \cdot R \cdot T}{V} \quad P_C = \frac{n_C \cdot R \cdot T}{V}$$

- Multiplicamos e dividimos, os segundos membros de cada unha das expresións das presións parciais por n_T

$$P_A = \frac{n_T}{n_T} \cdot \frac{n_A \cdot R \cdot T}{V} \quad P_B = \frac{n_T}{n_T} \cdot \frac{n_B \cdot R \cdot T}{V} \quad P_C = \frac{n_T}{n_T} \cdot \frac{n_C \cdot R \cdot T}{V}$$

- Ordenamos termos:

$$P_A = \frac{n_A}{n_T} \cdot \frac{n_T \cdot R \cdot T}{V}; \quad P_B = \frac{n_B}{n_T} \cdot \frac{n_T \cdot R \cdot T}{V} \quad e \quad P_C = \frac{n_C}{n_T} \cdot \frac{n_T \cdot R \cdot T}{V}$$

- Os cocientes: $\frac{n_A}{n_T}$, $\frac{n_B}{n_T}$ e $\frac{n_C}{n_T}$, representan as correspondentes **fracción molaes** χ_A , χ_B e χ_C , de cada gas na mestura.
- Podendo escribirse a buscada relación do seguinte xeito:

$$P_A = \chi_A \cdot P_T$$

$$P_B = \chi_B \cdot P_T$$

$$P_C = \chi_C \cdot P_T$$

Expresións moi útiles xa que permiten obter o valor das Presións parciais/Presión total, sen necesidade de coñecer o volume do recipiente que contén a mestura gasosa.

5. DISOLUCIÓNS. TIPOS. SOLUBILIDADE. EXPRESIÓN DA CONCENTRACIÓN DUNHA DISOLUCIÓN.

Unha disolución é unha mestura homoxénea de dúas ou máis substancias. En toda disolución hai que distinguir: o soluto e o disolvente. O **soluto** é a substancia que se encontra en menor cantidade (moles). O **disolvente** é a substancia que se encontra en maior cantidade (en moles) nunha disolución. Cando o disolvente é auga a disolución dise ACUOSA.

Cando dous fluídos (líquido ou gas) son solubles entre si en todas as proporcións, dise que son MISCIBLES.

Por **solubilidad**, enténdese a máxima cantidade de soluto que pode disolverse nunha determinada cantidade de disolvente, para obter unha disolución a unha temperatura dada. A solubilidad é a concentración da disolución saturada a unha temperatura determinada. A solubilidad dun soluto sólido nun disolvente determinado adoita aumentar ao elevar a temperatura, de maneira que poderemos disolver máis cantidade de soluto se aumentamos a temperatura da mestura. Pola contra, cando se trata de gases, a súa solubilidad nun disolvente adoita aumentar ao diminuír a temperatura.

Considérase que unha substancia é **insoluble** se a cantidade presente é menor de 0.02 moles de soluto por litro de disolvente. A solubilidad dunha substancia está afectada entre outros polos seguintes factores: Natureza das substancias, polaridade, temperatura, presión (para caso de gases).

Concentración: é a cantidade de soluto presente nunha cantidade dada de disolvente ou de disolución. Atendendo á concentración as disolucións poden clasificarse en: diluídas (se a cantidade de soluto respecto do disolvente é pequena) e concentradas (se a proporción de soluto con respecto do solvente é grande). Dise que unha disolución está saturada, a unha determinada temperatura, cando non admite máis cantidade de soluto disolto.

FORMAS DE EXPRESAR A CONCENTRACIÓN DUNHA DISOLUCIÓN

Porcentaxe en masa	% (m/m)	$\frac{\text{masa de soluto}}{\text{masa de disolución}} \cdot 100$
* Porcentaxe en volume	% (v/v)	$\frac{\text{volume de soluto}}{\text{volume de disolución}} \cdot 100$
* Concentración en masa	g/L	$\frac{\text{masa de soluto (g)}}{\text{volume de disolución (L)}}$
* Concentración molar (Molaridade)	M	$\frac{\text{cantidade de substancia de soluto (mol)}}{\text{volume de disolución (L)}}$
Molalidade	m	$\frac{\text{cantidade de substancia de soluto (mol)}}{\text{masa de disolvente (kg)}}$
Fracción molar	χ_i	$\frac{\text{moles de soluto ou disolvente}}{\text{moles de soluto + moles de disolvente}}$

(*) Depende da temperatura, xa que o volume varía (contraese/dilatase) coa temperatura, o que non ocorre coa masa.

6. CÓMO EFECTUAR CÁLCULOS NAS REACCIÓNES QUÍMICAS.

Para acceder ao contido desta última pregunta premer sobre “**Cálculos na R. Químicas**”, no menú do tema de **Cálculos químicos**, a continuación de **Teoría**.