

Tema 3. Estequiometría.

1. Masa Atómica de los elementos. Unidad de Masa Atómica.

La masa de los átomos es muy pequeña (el átomo de plomo, por ejemplo, tiene una masa de $3.53 \cdot 10^{-26}$ Kg) por lo que utilizar las unidades habituales de masa resulta muy impráctico. Por ello se creó la Unidad de Masa Atómica (u.m.a.).

La Unidad de Masa Atómica se define como la doceava parte de la masa del isótopo de carbono-12. Su equivalencia en el S.I. es "1 u.m.a. = $1.66 \cdot 10^{-27}$ Kg".

Así pues, podemos representar la masa atómica de cualquier elemento comparándolo con la doceava parte de la masa del átomo de carbono-12. Por ejemplo, el cloro tiene una masa atómica de 35.45 u.m.a., lo que significa que tiene 35.45 veces más masa que la doceava parte de la masa del carbono-12.

La masa atómica de un elemento se representa con la letra mayúscula "A" seguida del símbolo del elemento entre paréntesis. El símbolo para Unidad de Masa Atómica es sus siglas "u.m.a.", aunque es común representarlo utilizando únicamente la letra "u" minúscula. Por ejemplo:

- $A(\text{He}) = 4 \text{ u} \rightarrow$ "La masa atómica del helio es de 4 unidades de masa atómicas".
- $A(\text{Cu}) = 63.5 \text{ u} \rightarrow$ "La masa atómica del helio es de 63.5 unidades de masa atómicas".

La masa atómica de un isótopo de cualquier elemento se suele aproximar (aunque no tiene por qué ser exactamente igual) a su número másico. La masa atómica de un elemento es la media ponderada de las masas de todos sus isótopos, esto es, la suma de la masa de cada isótopo multiplicada por su abundancia.

$$A(X) = \frac{\sum(m_i \cdot \%abundancia_i)}{100}$$

Por ejemplo, el Cloro tiene dos isótopos estables: ^{35}Cl con una abundancia del 75.77% y ^{37}Cl con una abundancia del 24.23%. La masa atómica del cloro se calculará como

$$A(\text{Cl}) = \frac{35 \cdot 75.77 + 37 \cdot 24.23}{100} = 35.48u$$

Nótese que el resultado no es exacto (35.45 u) por utilizar masas aproximadas para los isótopos.

2. Masa Molecular de un compuesto.

Al igual que la masa de los átomos, la masa de un compuesto es muy pequeña para representarla en gramos o kilogramos, por lo que también utilizaremos u.m.a.

La masa molecular de un compuesto se representa con una "M" seguida del compuesto entre paréntesis. Podemos calcular la masa molecular de cualquier

compuesto sumando las masas atómicas de todos sus átomos (¡ojo con los subíndices!). Por ejemplo:

$$M(H_2O) = 2 \cdot A(H) + 1 \cdot A(O) = 2 \cdot 1u + 1 \cdot 16u = 18u$$

$$M(Ca(NO_3)_2) = 1 \cdot A(Ca) + 2 \cdot A(N) + 6 \cdot A(O) = 1 \cdot 40u + 2 \cdot 14u + 6 \cdot 16u = 164u$$

3. Concepto de mol.

La u.m.a. se creó porque el uso de gramos o kilogramos es inconveniente para hablar de la masa de átomos y compuestos, pero a la hora de realizar reacciones químicas, ya sea en el laboratorio o en la industria, no utilizamos átomos sueltos, sino que empleamos cantidades enormes de ellos. Es por ello que nació el concepto de “mol”.

El **mol** es la unidad del Sistema Internacional para “cantidad de sustancia (n)”. Un mol de “algo” representa $6.022 \cdot 10^{23}$ unidades de ese “algo”. A este número se le conoce como el número de Avogadro (N_A).

$$N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

Un número tan grande no va a ser útil para contar cosas en el ámbito macroscópico (un mol de alumnos en un aula harían a cualquier profesor muy infeliz), pero es extremadamente conveniente para contar átomos y moléculas, ya que un mol de una sustancia de masa x u.m.a. tendrá una masa de x gramos. Es decir:

- Si la masa atómica del Na es 23 u, la masa de $6.022 \cdot 10^{23}$, o 1 mol de átomos de Na es 23 g.
- Si la masa molecular del agua es 18 u, la masa de $6.022 \cdot 10^{23}$, o 1 mol de moléculas de agua es 18 g.

4. Reacción química.

Una reacción química es un proceso por el cual sustancias iniciales se transforman en otras finales. Las sustancias de partida se denominan ‘reactivos’ y las que se forman ‘productos’. Por tanto, una reacción química se puede ver como un proceso en el que los átomos de una serie de moléculas se recombinan para formar sustancias nuevas, es decir, se produce una rotura de los enlaces en los reactivos y se forman enlaces nuevos en los productos.

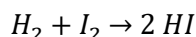
4.1. Teoría de colisiones.

La teoría de colisiones afirma que para que ocurra una reacción química es necesario que los reactivos colisionen. Sin embargo, no todas las colisiones son eficaces, para que un choque sea eficaz se deben de cumplir dos condiciones:

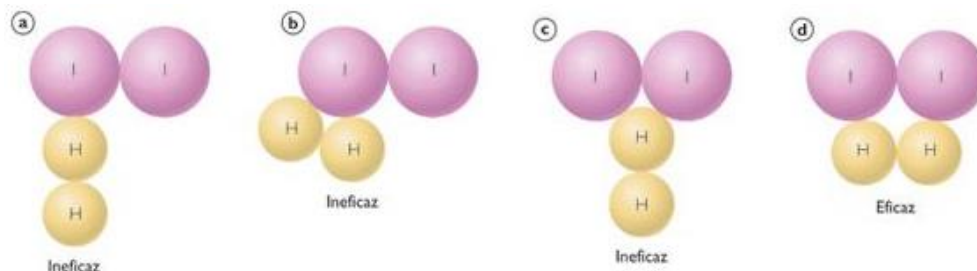
- Que las partículas de los reactivos tengan energía suficiente para romper sus enlaces y generar otros nuevos (energía de activación).
- Que los choques tengan la orientación adecuada.

La tasa de reacción aumentará con la temperatura pues las partículas tendrán más energía, haciendo más fácil superar la energía de activación. Los choques que no cumplen estas condiciones se denominan choques ineficaces o no efectivos.

Por ejemplo, para la reacción



Se produce la rotura de los enlaces H–H y I–I para formar la molécula de yoduro de hidrógeno (H–I) siempre que la energía y la orientación del choque sean los adecuados.



4.2. Símbolos en una reacción.

Una reacción química se representa mediante una ecuación química, en esta se ponen a la izquierda los reactivos y a la derecha los productos, separados por una flecha. Todas las sustancias se representan mediante su fórmula molecular, separadas unas de otras por '+' y señalando su estado de agregación. Algunos símbolos comunes en reacciones químicas:

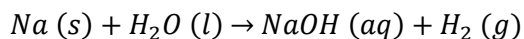
Símbolo	Significado
+	Se usa para separar dos reactivos o productos
→	Separa reactivos de productos en reacciones irreversibles
⇌	Separa reactivos de productos en reacciones reversibles
(s)	Sustancia en estado sólido
(l)	Sustancia en estado líquido
(g)	Sustancia en estado gaseoso
(aq) o (ac)	Sustancia en disolución acuosa
↓	Producto en estado sólido que precipita
↑	Producto en estado gaseoso que se escapa del medio
Δ	Aumento de temperatura
Q	Calor. Se puede encontrar con los reactivos para reacciones endotérmicas, o con los productos para exotérmicas
X →	X = Sustancia/s y/o condiciones que catalizan la reacción

4.3. Ajuste de reacciones.

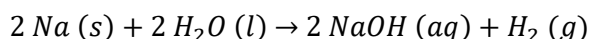
Para que una ecuación química sea significativa de la reacción que representa debe de estar ajustada, esto es, debe tener el mismo número de átomos de cada elemento en reactivos y en productos. Esto se consigue colocando números (generalmente enteros, aunque pueden usarse fraccionarios) delante de las fórmulas de cada sustancia, estos números se

denominan 'coeficientes estequiométricos'. El coeficiente estequiométrico delante de una sustancia indica cuantas moléculas, moles, o volúmenes (según el cálculo que estemos haciendo) de esa sustancia están participando en la reacción.

Por ejemplo, la reacción del sodio con agua:



No estaría ajustada, ya que hay distinto número de átomos de hidrógeno en los reactivos y en los productos. Mediante tanteo, podemos llegar a la siguiente combinación de coeficientes estequiométricos:



Que resultan en la reacción ajustada.

5. Cálculos estequiométricos.

El ajuste de una reacción química nos proporciona las cantidades de cada sustancia (moléculas, moles o volúmenes) con las que se relacionan en una reacción. Los cálculos necesarios para conocer todas las cantidades implicadas en una reacción se denominan 'cálculos estequiométricos'. Estos cálculos están basados en las siguientes leyes:

- Ley de conservación de masas: Enunciada por Lavoisier, la ley de conservación de masas dice "En una reacción química, la masa total de reactivos es igual a la masa total de productos".
- Ley de Gay-Lussac: "Cuando la Presión y la Temperatura son constantes en una reacción química, los volúmenes de los gases reaccionantes y de los gases obtenidos guardan una relación numérica sencilla" (esta relación viene dada por sus coeficientes estequiométricos).
- Ley de los gases ideales (ecuación de Clapeyron): El volumen de cualquier gas depende únicamente de las condiciones en las que se mide. Así, el volumen de un mol de moléculas o átomos de cualquier gas en condiciones normales (273 K, 1 atm) es de 22.4 litros. Si tenemos n moles:

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

Siendo R la constante de los gases ideales, cuyo valor es $0.082 \frac{\text{atm} \cdot \text{L}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$.

- Ley de Dalton o de la suma de presiones parciales: "La presión total de una mezcla de gases es la suma de las presiones parciales de sus componentes, $P = P_A + P_B + P_C + \dots$. Donde la presión parcial de un gas es igual a la fracción molar del gas multiplicada por la presión total de la mezcla, $P_i = \chi_i \cdot P$."

En términos generales, los pasos a seguir para llevar a cabo un cálculo estequiométrico son:

- 1º. Escribir la reacción con sus fórmulas moleculares correctas tanto para reactivos como productos.
- 2º. Ajustar la reacción.
- 3º. Convertir en moles las cantidades de materia (masas, volúmenes, concentraciones, pureza, etc.) que nos dan como datos.
- 4º. Hallar los moles de las sustancias que no tenemos mediante los coeficientes estequiométricos obtenidos al ajustar la reacción utilizando factores de conversión. (No hacer reglas de tres).
- 5º. Hallar los resultados que nos estén pidiendo en el problema. Estos resultados pueden ser moles, gramos, volúmenes, etc.

Los reactivos y productos pueden encontrarse en multitud de diferentes estados de agregación, lo cual genera una gran cantidad de combinaciones que podemos resumir en los siguientes apartados:

5.1. Cálculos masa – masa.

Para conocer la masa de un producto o reactivo sabiendo la masa de otro, hay que conocer la relación molar entre las sustancias, dada por la ecuación química ajustada.

Por ejemplo:

¿Cuántos gramos de agua se formarán a partir de un gramo de hidrógeno y la cantidad necesaria de oxígeno?

- Reacción ajustada: $2 H_2(g) + O_2(g) \rightarrow 2 H_2O(g)$
- Calculamos moles de hidrógeno en 1 g, sabiendo que $M(H_2) = 2 \text{ g/mol}$:

$$m = n \cdot M \Rightarrow n = \frac{m}{M} = \frac{1 \text{ g}}{2 \text{ g/mol}} = 0.5 \text{ mol } H_2$$

- Usamos factores de conversión para hallar los moles de agua:

$$0.5 \text{ mol } H_2 \cdot \frac{2 \text{ mol } H_2O}{2 \text{ mol } H_2} = 0.5 \text{ mol } H_2O$$

- Calculamos masa de 0.5 mol H_2O , sabiendo que $M(H_2O) = 18 \text{ g/mol}$:

$$m = n \cdot M = 0.5 \text{ mol } H_2O \cdot 18 \text{ g/mol} = \boxed{9 \text{ g } H_2O}$$

5.2. Cálculos volumen – volumen.

Cuando tenemos sustancias gaseosas y queremos hallar su volumen, procedemos de forma similar a la anterior, es decir, utilizamos la relación molar entre ambas y, posteriormente, haríamos uso de la ley de los gases ideales.

Por ejemplo:

¿Qué volumen de vapor de agua, medido en condiciones normales, se formarán a partir de 1 litro de oxígeno y la cantidad necesaria de hidrógeno?

- Reacción ajustada: $2 H_2(g) + O_2(g) \rightarrow 2 H_2O(g)$
- Calculamos moles de oxígeno en 1 litro:

$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T \Rightarrow n = \frac{P \cdot V}{R \cdot T} = \frac{1 \text{ atm} \cdot 1 \text{ L}}{0.082 \frac{\text{atm} \cdot \text{L}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273 \text{ K}} = 0.045 \text{ mol } O_2$$

- Usamos factores de conversión para hallar los moles de agua:

$$0.045 \text{ mol } O_2 \cdot \frac{2 \text{ mol } H_2O}{1 \text{ mol } O_2} = 0.09 \text{ mol } H_2O$$

- Calculamos el volumen de 0.09 mol H_2O :

$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T \Rightarrow V = \frac{n \cdot R \cdot T}{P} = \frac{0.09 \text{ mol} \cdot 0.082 \frac{\text{atm} \cdot \text{L}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273 \text{ K}}{1 \text{ atm}} = \boxed{2 \text{ L } H_2O}$$

NOTA: También podemos hallar directamente la relación entre volúmenes de dos sustancias gaseosas utilizando la Ley de Gay-Lussac:

$$1 \text{ L } O_2 \cdot \frac{2 \text{ L } H_2O}{1 \text{ L } O_2} = \boxed{2 \text{ L } H_2O}$$

5.3. Cálculos masa – volumen.

La relación entre cantidad de materia y volumen en una sustancia gaseosa viene dada por la ecuación de gases ideales. Por lo tanto podemos hallar primero la relación en moles y, posteriormente hallar el volumen de la sustancia gaseosa con la ecuación de los gases ideales.

Por ejemplo:

¿Qué volumen de hidrógeno, medido en condiciones normales, se producirá en la reacción de 1 g de sodio con la cantidad necesaria de agua?

- Reacción ajustada: $2 Na (s) + 2 H_2O (l) \rightarrow 2 NaOH (aq) + H_2 (g)$
- Calculamos moles de sodio en 1 g, sabiendo que $A(Na) = 23 \text{ g/mol}$:

$$m = n \cdot A \Rightarrow n = \frac{m}{A} = \frac{1 \text{ g}}{23 \text{ g/mol}} = 0.043 \text{ mol } Na$$

- Usamos factores de conversión para hallar los moles de hidrógeno:

$$0.043 \text{ mol } Na \cdot \frac{1 \text{ mol } H_2}{2 \text{ mol } Na} = 0.022 \text{ mol } H_2$$

- Calculamos el volumen de 0.022 mol H_2 :

$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T \Rightarrow V = \frac{n \cdot R \cdot T}{P} = \frac{0.022 \text{ mol} \cdot 0.082 \frac{\text{atm} \cdot \text{L}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273 \text{ K}}{1 \text{ atm}} = \boxed{0.49 \text{ L } H_2}$$

5.4. Cálculos con reactivo limitante.

En la industria o laboratorio, las cantidades de reactivos utilizados experimentalmente no son estequiométricas (exactas). Esto implica que la reacción termina cuando se consume totalmente uno de los reactivos. Se denomina 'reactivo limitante' al reactivo que se consume totalmente y 'reactivo en exceso' al que sólo se consume parcialmente.

Para determinar el reactivo limitante comparamos la relación molar entre los reactivos. Una vez determinado, los demás cálculos se realizan igual utilizando únicamente los datos del reactivo limitante.

Por ejemplo:

¿Cuántos gramos de agua se formarán a partir de un gramo de hidrógeno y 10 gramos de oxígeno?

- Reacción ajustada: $2 H_2(g) + O_2(g) \rightarrow 2 H_2O(g)$
- Calculamos moles de hidrógeno en 1 g y los moles de oxígeno en 10 g, sabiendo que $M(H_2) = 2 \text{ g/mol}$ y $M(O_2) = 32 \text{ g/mol}$:

$$m = n \cdot M \Rightarrow \begin{cases} n_{H_2} = \frac{m_{H_2}}{M_{H_2}} = \frac{1 \text{ g}}{2 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0.5 \text{ mol } H_2 \\ n_{O_2} = \frac{m_{O_2}}{M_{O_2}} = \frac{10 \text{ g}}{32 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0.31 \text{ mol } O_2 \end{cases}$$

- Usando factores de conversión, calculamos la cantidad teórica de uno de los reactivos para consumir completamente los moles que tenemos del otro:

$$0.5 \text{ mol } H_2 \cdot \frac{1 \text{ mol } O_2}{2 \text{ mol } H_2} = 0.25 \text{ mol } O_2$$

Como $0.31 \text{ mol } O_2 > 0.25 \text{ mol } O_2$; entonces el oxígeno está en exceso (cuando termine la reacción nos sobrarán $0.06 \text{ mol } O_2$ sin reaccionar).

- Hacemos el resto de los cálculos necesarios ignorando el oxígeno, que es el reactivo en exceso, y usando solamente los datos del hidrógeno, que es el reactivo limitante.

5.5. Cálculos con disoluciones.

En el caso de sustancias en disolución, tenemos que tener en cuenta la concentración de las disoluciones para calcular la cantidad de esa sustancia presente. Dependiendo de la forma en la que esté expresada la concentración, tendremos que hacer diferentes pasos para hallar la cantidad de moles de soluto.

Una vez tenemos la cantidad de moles de soluto, los cálculos continúan de forma regular.

Por ejemplo:

¿Qué masa de cloruro sódico se obtendrá al reaccionar 250 mL de una disolución 1 M de ácido clorhídrico con una cantidad en exceso de sosa?

- Reacción ajustada: $HCl(aq) + NaOH(aq) \rightarrow NaCl(s) + H_2O(l)$
- Calculamos cuantos moles de HCl hay en 250 mL de una disolución 1 M:

$$C = \frac{n_{\text{soluto}}}{V_{\text{disolución}}(L)} \Rightarrow n_{\text{soluto}} = C \cdot V_{\text{disolución}}(L) = 1 M \cdot 0.25 L = 0.25 \text{ mol } HCl$$

- Hacemos el resto de los cálculos necesarios, para una cantidad de HCl de 0.25 mol.

5.6. Pureza o riqueza de reactivos.

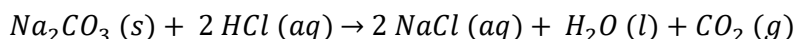
Algunas veces, los reactivos utilizados no son puros, es decir, se encuentran formando parte de una mezcla de sustancias, y hay que conocer en qué cantidad se encuentra el reactivo. La pureza de un reactivo se da mediante tanto por ciento:

$$\text{pureza} = \frac{\text{masa pura}}{\text{masa total}} \cdot 100$$

Por ejemplo:

¿Qué volumen de dióxido de carbono, medido en condiciones normales, se desprenderá al hacer reaccionar 100 g de un mineral de carbonato de sodio, de una pureza del 30%, con un exceso de ácido clorhídrico?

- Reacción ajustada:



- Calculamos la cantidad de carbonato sódico en nuestra muestra:

$$\text{pureza} = \frac{\text{masa pura}}{\text{masa total}} \cdot 100 \Rightarrow m_{\text{pura}} = \frac{\text{pureza} \cdot m_{\text{total}}}{100} = \frac{30\% \cdot 100 \text{ g}}{100} = 30 \text{ g } Na_2CO_3$$

- Hacemos el resto de los cálculos necesarios, para una cantidad de Na_2CO_3 de 30 g.

5.7. Rendimiento de una reacción.

La mayor parte de las veces, en una reacción química se obtienen menos cantidades de productos de los que teóricamente deberían producirse. Esto es consecuencia de posibles reacciones secundarias, condiciones no óptimas, o simplemente razones energéticas. Definimos el rendimiento de una reacción química mediante un tanto por ciento cuya expresión es:

$$\text{rendimiento} = \frac{\text{masa obtenida}}{\text{masa teórica}} \cdot 100$$

Para calcular el rendimiento de una reacción, hacemos los cálculos habituales para hallar la masa teórica que deberíamos obtener de producto y luego la comparamos con la masa que nos indican que hemos obtenido.

Por ejemplo:

¿Qué rendimiento tendrá una reacción de formación de agua si, partiendo de 1 g de hidrógeno y oxígeno en exceso, obtenemos 7 g de agua?

- Reacción ajustada: $2 H_2(g) + O_2(g) \rightarrow 2 H_2O(g)$
- Calculamos moles de hidrógeno en 1 g, sabiendo que $M(H_2) = 2 \text{ g/mol}$:

$$m = n \cdot M \Rightarrow n = \frac{m}{M} = \frac{1 \text{ g}}{2 \text{ g/mol}} = 0.5 \text{ mol } H_2$$

- Usamos factores de conversión para hallar los moles teóricos de agua:

$$0.5 \text{ mol } H_2 \cdot \frac{2 \text{ mol } H_2O}{2 \text{ mol } H_2} = 0.5 \text{ mol } H_2O$$

- Calculamos masa de 0.5 mol H_2O , sabiendo que $M(H_2O) = 18 \text{ g/mol}$:

$$m = n \cdot M = 0.5 \text{ mol } H_2O \cdot 18 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 9 \text{ g } H_2O$$

- Una vez tenemos la masa teórica, calculamos el rendimiento:

$$\text{rendimiento} = \frac{\text{masa obtenida}}{\text{masa teórica}} \cdot 100 = \frac{7 \text{ g}}{9 \text{ g}} \cdot 100 = \boxed{77.78\%}$$

NOTA: El rendimiento nunca puede ser mayor del 100%. Si obtienes un valor de rendimiento superior es que has hecho algún cálculo mal o has confundido la masa obtenida con la teórica.