## Tema 1. Conceptos Básicos en Química

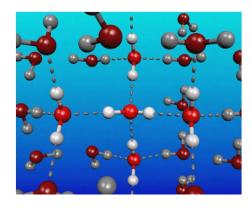
- Química
- Átomo: números másicos y atómicos
- Mol
- Fórmulas empíricas y moleculares
- Reacciones químicas
- Gases
- Disoluciones

## ¿Qué es la Química?

 Ciencia que estudia la composición y propiedades de las sustancias y las reacciones por las que unas sustancias se transforman en otras.





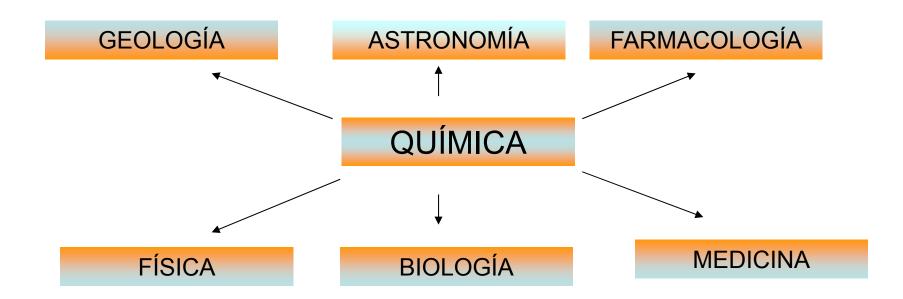


Visión macroscópica

Visión microscópica

## ¿Qué es la Química?

El lenguaje de la Química es un lenguaje científico universal que se emplea ampliamente fuera de la Química



Desde los tiempos de Rutherford, se han descubierto muchas partículas subatómicas. Sin embargo para los químicos para describir el átomo son suficientes tres partículas:

ELECTRÓN, PROTÓN, NEUTRÓN.

Electrones: carga –1 (unidad carga atómica = 1.602·10<sup>-19</sup> C)

Protones: carga +1

Neutrones: carga 0

En principio, los átomos son eléctricamente neutros

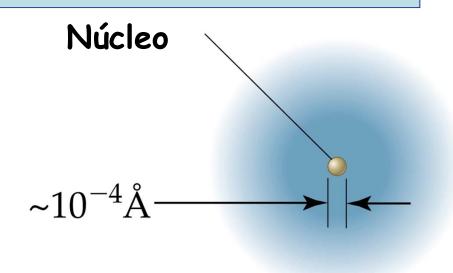
Número de electrones = número de protones

Los átomos son muy pequeños, con diámetros comprendidos entre 1 x 10<sup>-10</sup> m y 5 x 10<sup>-10</sup> m, o 100-500 pm.

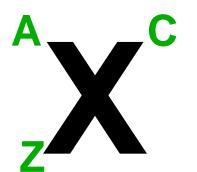
$$1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$$

 Una unidad muy extendida para medir dimensiones a escala atómica es el angstrom (Å).

$$1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$$



Partícula	Localización	Carga relativa	Masa relativa			
Protón	Núcleo	+1	1.00728			
Neutrón	Núcleo	0	1.00867			
Electrón	Fuera del núcleo	-1	0.00055			



A – Masa atómica

N° Total Protones y Neutrones

Z – Número atómico

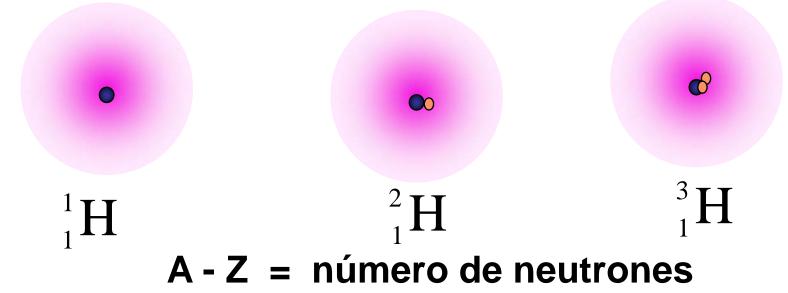
N° Total Protones

C – Carga

Valores + o -

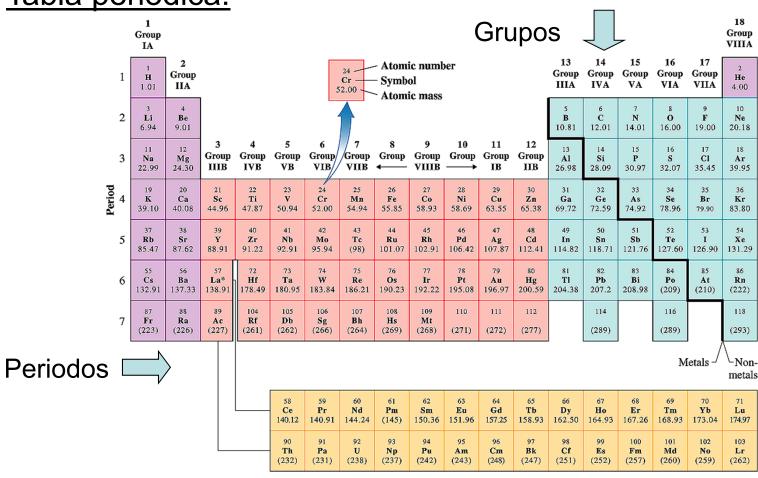
El número atómico caracteriza al elemento

Dos átomos con igual Z y diferente A se denominan isótopos



**Z-C** = número de electrones

Tabla periódica:



47 Plata

Ag

107.87

Número Atómico Nombre del elemento

Símbolo del Elemento

Masa atómica (peso)

Se conocen ~110 elementos

- 87 son metales
- 27 son radiactivos
- 16 son artificiales (radiactivos)
- 11 son gases
- 2 son líquidos

#### Masas atómicas:

Se define (DE FORMA ARBITRARIA) la masa del isótopo <sup>12</sup>C como equivalente a 12 unidades de masa atómica (umas)

1 uma = 1/12 la masa del  $^{12}$ C =  $1.66054 \times 10^{-24}$  g

De esta forma puede construirse una <u>escala relativa</u> de pesos atómicos, que suele aparecer en la Tabla Periódica.

#### Masas relativas:

A<sub>r</sub> Masa atómica relativa

M<sub>r</sub> Masa Molecular relativa

I<sub>r</sub> Masa Isotópica relativa

Ejemplos de masas atómicas:

Elemento	C	Н	0	CI			
A <sub>r</sub> (uma)	12.0107	1.0079	15.9994	35.453			

- El carbono presenta tres isótopos en la Naturaleza: <sup>12</sup>C, <sup>13</sup>C y
   <sup>14</sup>C.
- La existencia de dos o más isótopos de un mismo elemento se puede demostrar utilizando un espectrómetro de masas.
- La masa atómica del elemento es la media proporcional de las masas de los isótopos que lo componen:

	Masa atómica	Abundancia (%)
<sup>35</sup> C1	34.97	75.53
<sup>37</sup> C1	36.97	24.47

La masa atómica relativa del cloro es:

$$34.97 \times \frac{75.53}{100} + 36.97 \times \frac{24.47}{100} = \boxed{35.45}$$

#### Masa Molecular

Dos o más átomos se combinan para formar estructuras estables denominadas moléculas. La unión entre átomos se denomina enlace (y lo estudiaremos en el tema siguiente)

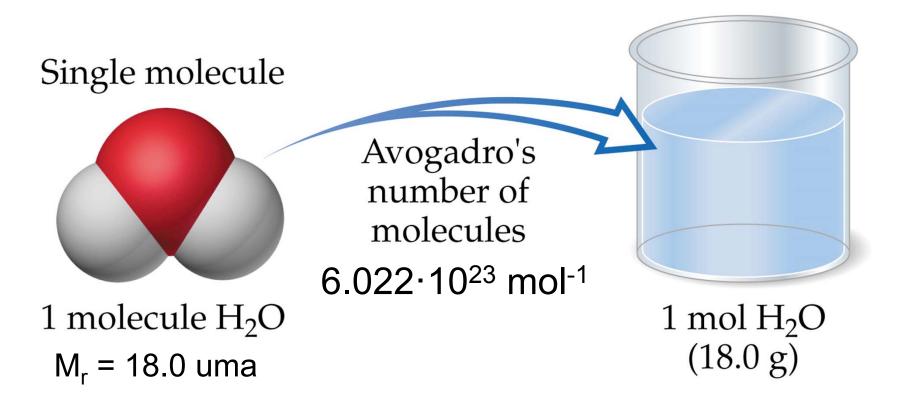
La masa molecular (M<sub>r</sub>) es igual a

la suma de las masas atómicas relativas de los átomos de la fórmula de dicha sustancia:

$$M_r (H_2SO_4) = 2 A_r (H) + A_r (S) + 4 A_r (O) =$$
  
= 2 × 1.0 + 32.0 + 4 × 16.0 = 98.0

#### El Mol

Laboratory-sized sample



$$n_{\text{moles}} = N_{\text{moleculas}} / N_{A}$$

#### El Mol

El número de Avogadro se elige de tal forma que la masa atómica (y molecular) puede interpretarse bien como:

- La masa en umas de un átomo (o molécula)
- La masa en gramos de un mol de átomos (o moléculas)

Ej: la masa molecular del H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> son 98:

- Una molécula de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> pesa 98 uma
- Un mol de moléculas de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> (6.022·10<sup>23</sup> moléculas)
   pesan 98 gramos

$$n_{\text{moles}} = m(g)/M_r(g \cdot mol^{-1})$$

#### El Mol

Para convertir en moles (n) los gramos (m) de cualquier sustancia sólo hay que dividir por la masa molecular (M) de dicha sustancia:

$$n = \frac{m}{M}$$

¿Cuántos moles hay en 24.5 g de ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>)?

M= 98 g/mol 
$$24.5$$
 g de  $H_2SO_4$  = 0.25 mol de  $H_2SO_4$  = 0.25 mol de  $H_2SO_4$ 

Para convertir en átomos o moléculas (N) en moles (n) hay que dividir por el número de Avogadro:  $n = \frac{N}{N_A}$ 

#### FÓRMULA EMPÍRICA:

Es la relación más sencilla de números enteros entre los átomos que componen la molécula.

#### FÓRMULA MOLECULAR:

Los números relativos de los átomos son los de la molécula real del compuesto.

#### FÓRMULA ESTRUCTURAL:

Indica cómo están enlazados los átomos en la molécula.

La fórmula empírica no tiene necesariamente que coincidir con la fórmula molecular.

fórmula molecular = n × fórmula empírica

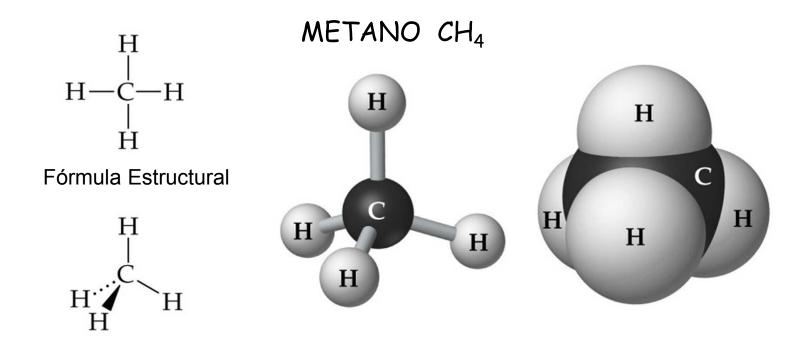
Por ejemplo, BENCENO:

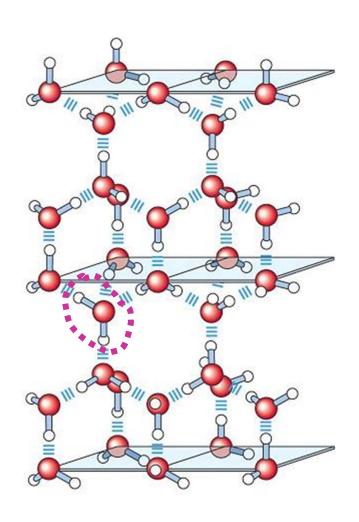
Fórmula empírica: CH,

Fórmula molecular: C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>.

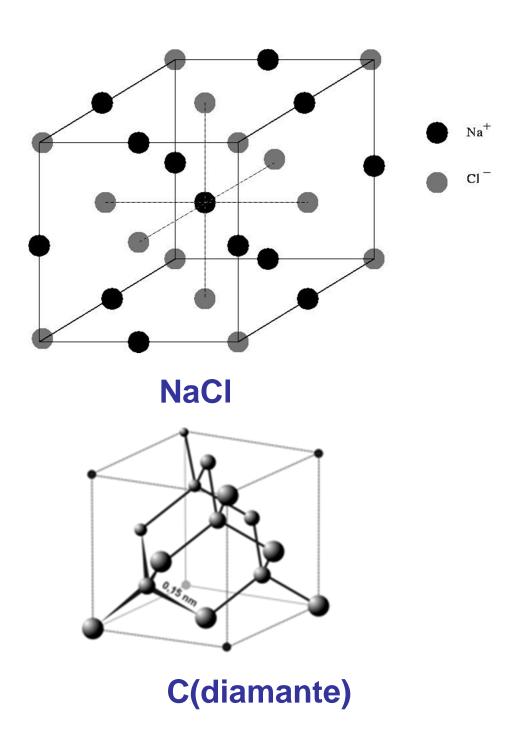
Fórmula estructural:

Una molécula puede representarse de distintas formas...





Hielo H<sub>2</sub>O



Ejemplo: calcular la fórmula empírica para un compuesto que contiene 6.64 g de K, 8.84 g de Cr y 9.52 g de O.

a) Se calcula el número de moles de cada elemento: b) Y se divide por el menor número de moles

6.64 
$$\frac{\text{g de K x}}{39.1 \text{ g de K}} = 0.170 \text{ mol de K} / 0.170 \text{ mol K} = 1 \text{ mol K /mol K}$$

8.84 g de Cr x 
$$\frac{1 \text{ mol de Cr}}{52.0 \text{ g de Cr}} = 0.170 \text{ mol de Cr} / 0.170 \text{ mol K} = 1 \text{ mol Cr /mol K}$$

9.52 g de 0 x 
$$\frac{1 \text{ mol de O}}{16.0 \text{ g de O}}$$
 = 0.595 mol de O / 0.170 mol K = 3.5 mol O /mol K

1 K: 1 Cr: 3.5 O  $\Longrightarrow$  2 K: 2 Cr: 7 O  $\Longrightarrow$  K<sub>2</sub>Cr<sub>2</sub>O<sub>7</sub>

Para poder calcular la fórmula molecular es preciso conocer:

- -la fórmula empírica
- -la masa molecular

Ejemplo: la fórmula empírica de la glucosa es CH<sub>2</sub>O, y su masa molecular es 180. Escribir su fórmula molecular.

fórmula molecular = 
$$n \times (CH_2O)$$

Masa molecular = 
$$n \times Masa(CH_2O)$$

Masa (
$$CH_2O$$
) = 12 + 2 + 16 = 30

$$n = \frac{180 \text{ g/mol glucosa}}{30 \text{ g de CH}_2\text{O}} = 6 \implies (\text{CH}_2\text{O})_6 \implies \boxed{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6}$$

 Reacción Química: Proceso en el cual un conjunto de sustancias (reactivos) se transforma en otro conjunto de nuevas sustancias (productos).

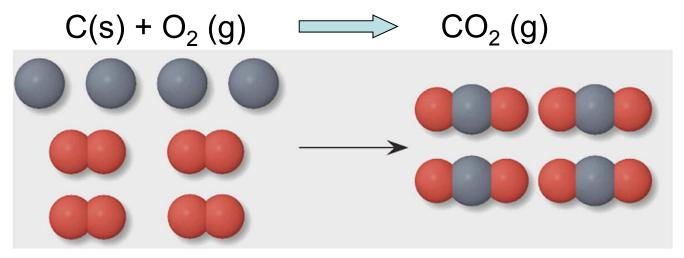
 Ecuación Química: Indica las sustancias y la proporción en que participan en la reacción

#### • Una ecuación química debe contener:

- Todos los reactivos
  - Todos los productos
    - •El estado físico de las sustancias
      - Las condiciones de la reacción, P, T, cat,...
        - Las proporciones de reactivos

y productos

$$CaCO_3$$
 (s)  $\xrightarrow{\Delta}$   $CaO$  (s) +  $CO_2$  (g)



1 átomo de carbono combina con 2 de oxígeno (1 molécula de O<sub>2</sub>) para dar una molécula de CO<sub>2</sub>

1 mol de carbono combina con 2 moles de oxígeno (1 mol de O<sub>2</sub>) para dar un mol de CO<sub>2</sub>

12 gramos de carbono combinan con 32 gramos de oxígeno para dar 44 de CO<sub>2</sub>

$$2C(s) + O_2(g) \longrightarrow 2CO(g)$$

2 átomos de carbono combinan con 2 de oxígeno (1 molécula de O<sub>2</sub>) para dar 2 moléculas de CO

2 moles de carbono combinan con 2 moles de oxígeno (1 mol de O<sub>2</sub>) para dar 2 moles de CO

24 gramos de carbono combinan con 32 gramos de oxígeno para dar 56 de CO

#### Ajuste reacciones químicas

Debe cumplirse la ley de conservación de la masa.

Debe haber el mismo número de átomos de cada elemento a ambos lados de la ecuación, en los reactivos y en los productos.

$$CH_3CH_2OH(I) + O_2(g) \longrightarrow CO_2(g) + H_2O(I)$$

$$CH_3CH_2OH (I) + 3 O_2 (g) \longrightarrow 2 CO_2 (g) + 3 H_2O (I)$$

Ley de conservación de la masa (Lavoisier, 1774):

La masa total de las sustancias antes y después de una reacción química es la misma.

- No poner fórmulas de sustancias que no intervienen.
- Ajustar primero los elementos que aparezcan solo en un compuesto a ambos lados de la ecuación
- Si un elemento aparece como elemento libre, ajustarlo el último.

Ejemplo: Ajustar la reacción de oxidación del hierro metálico para dar óxido férrico

Fe (s) + 
$$O_2(g) \rightarrow Fe_2O_3(s)$$

4 Fe (s) + 
$$3 O_2$$
 (g)  $\rightarrow 2 Fe_2O_3$  (s)

4 moles de Fe reaccionan con 3 moles de O<sub>2</sub> para dar 2 moles de Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

Ejemplo: ¿Cuantos moles de Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> se producirán a partir de...

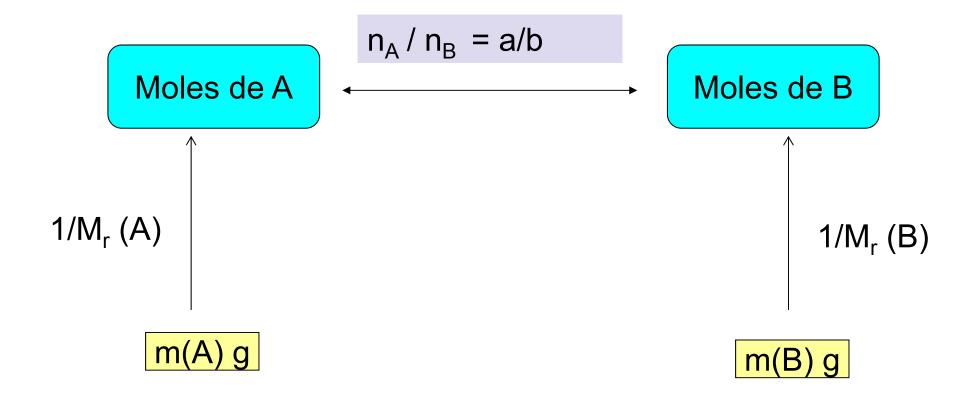
4 moles de Fe?

2 moles de Fe? 8 moles de Fe? 1 mol de Fe?

0.5

#### Cálculos con reacciones químicas

• a A (g) + b B(g) 
$$\rightarrow$$
 c C (g) + d D (g)



• 
$$a A (g) + b B(g) \rightarrow c C (g) + d D (g)$$

 El paso clave es utilizar correctamente el factor estequiométrico entre los componentes de interés.

$$n_{A} / n_{B} = a/b$$

$$n_{A} = (a/b) n_{B}$$

$$n_{B} = (b/a) n_{A}$$

$$n_{B} = (b/c) n_{C}$$

$$n_{C} = (c/b) n_{B}$$

#### Ejemplo: para la reacción

$$2 \text{ Al}(OH)_3 + 3 H_2SO_4 \rightarrow 6 H_2O + Al_2(SO_4)_3$$

1. ¿Cuántos moles de  $H_2SO_4$  se necesitan para producir 8.0 moles de  $Al_2(SO_4)_3$ ?

$$8 \text{ mol Al}_{2}(SO_{4})_{3} \times = 24 \text{ mol de H}_{2}SO_{4}$$

$$1 \text{ mol Al}_{2}(SO_{4})_{3}$$

2. ¿Cuántos moles de H<sub>2</sub>O se obtendrán a partir de 234 g de Al(OH)<sub>3</sub> ?

$$\frac{234 \text{ g de AL(OH)}_3}{78 \text{ g de Al(OH)}_3 / \text{mol Al(OH)}_3} = 3 \text{ moles de Al(OH)}_3$$

$$3 \text{ mol de Al(OH)}_3 \qquad x \qquad \begin{array}{r} 6 \text{ mol de H}_2\text{O} \\ \hline 2 \text{ mol Al(OH)}_3 \end{array} = 9 \text{ moles de H}_2\text{O}$$

La fuerza por unidad de área o presión (**P**) ejercida por las moléculas de un gas sobre las paredes internas de un recipiente de volumen **V** depende de la cantidad de gas presente (número de moles, **n**) y la temperatura **T** 

La relación existente entre esas magnitudes se conoce como **ecuación de estado** del gas

Muchos gases, en condiciones en que la concentración no sea muy alta siguen una misma ecuación de estado conocida como del **ley de los gases ideales**:

$$pV = nRT$$

$$pV = nRT$$

• p ó P = presión

Se mide en Pascales (Newton/m²); atmósferas (1 atm = 101325 Pa); milímertos de mercurio o Torricelis (760 mmHg = 1 atms) o Bar (1bar = 100000 Pa)

• V = volumen

Se mide en metros cúbicos (SI) o en litros (  $1000 L = 1 m^3$ )

- n = moles
- T = temperatura

Se mide en Kelvin (T(K) =  $T(^{\circ}C)$  + 273.15)

• R = constante de los gases ideales

0.08206 L atm mol-1 K-1

8,3145 J mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>

## Ley de Dalton de las presiones parciales

 La presión total de una mezcla de gases es la suma de la presión que cada gas ejercería si estuviera sólo (válido estrictamente para gases ideales).

$$P_{total} = P_a + P_b + P_c + \dots$$

- La presión ejercida por cada componente individual de la mezcla de gases se denomina "presión parcial".
- Se aplica a mezclas de gases que no reaccionan (por ejemplo, aire).

La ley de Dalton puede deducirse admitiendo que cada uno de los gases de la mezcla cumple la ecuación de los gases ideales:

 $P_jV = n_jRT$ 

Comprobación:

$$P = \frac{RT}{V}n = \frac{RT}{V}\sum_{j}n_{j} = \sum_{j}\frac{n_{j}RT}{V} = \sum_{j}P_{j}$$

La relación entre la presión parcial del gas j y la presión total depende de la relación entre los moles de j y los totales:

$$\frac{P_j}{P} = \frac{n_j}{n} = X_j$$

La relación entre el número de moles de un compuesto j y el número de moles totales se conoce como fracción molar del compuesto j

**Ejemplo**: ¿Cuál es la fracción molar de  $O_2$ ,  $CO_2$  y  $N_2$  en una mezcla de gases 0.2 mol  $O_2$ , 0.3 mol  $CO_2$ , 0.7 mol  $N_2$ ?

Moles totales = 1.2 mol

$$x_{O2} = 0.2 \text{ mol} / 1.2 \text{ mol} = 0.17$$

$$x_{CO2} = 0.3 \text{ mol} / 1.2 \text{ mol} = 0.25$$

$$x_{N2} = 0.7 \text{ mol} / 1.2 \text{ mol} = 0.58$$

$$x_{O2} + x_{CO2} + x_{N2} = 0.17 + 0.25 + 0.58 = 1.0$$

#### **Disoluciones**

 Disolución: mezcla homogénea de dos o más sustancias.

 Disolvente: componente que está presente en mayor cantidad y determina el estado de agregación en el que existe una disolución.

Solutos: Los restantes componentes

#### **Disoluciones**

#### Formas de expresar la concentración:

#### **MOLARIDAD**

Unidades: mol·L<sup>-1</sup> (molar, M)

Desventaja: Varía con T

Ventaja: Facilidad para medir V

#### molalidad

$$m_i = \frac{n_i}{kg \text{ disolvente}}$$

Unidades: mol·kg<sup>-1</sup> (molal, m)

Ventaja: No varía con T

#### **Disoluciones**

Fracción molar

$$\mathbf{x}_{i} = \frac{\mathbf{n}_{i}}{\mathbf{n}_{Tot}}$$

Representa el tanto por uno en moles de i

Adimensional

 $0 < x_i < 1$ 

Porcentaje en peso (% p/p)

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

Partes por millón:

$$ppm = \frac{masa \ soluto}{masa \ disolución} \cdot 10^{\circ}$$

### Determinación del número de moles

sólido

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

gas

$$n = \frac{P(atm)V(L)}{R(atm \cdot L \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1})T(K)}$$

disolución

$$n = M(mol/L) \cdot V(L)$$

	1 Group IA																	18 Group VIIIA
1	1 H 1.01	Group IIA		Atomic number  Cr Symbol  52.00 Atomic mass							13 Group IIIA	14 Group IVA	15 Group VA	16 Group VIA	17 Group VIIA	2 <b>He</b> 4.00		
2	3 <b>Li</b> 6.94	4 Be 9.01			Atomic mass							5 <b>B</b> 10.81	6 C 12.01	7 <b>N</b> 14.01	8 <b>O</b> 16.00	9 <b>F</b> 19.00	10 Ne 20.18	
3	11 <b>Na</b> 22.99	12 Mg 24.30	3 Group IIIB	4 Group IVB	5 Group VB	6 Group VIB	7 Group VIIB	8 Group ←	9 Group VIIIB	Group	11 Group IB	12 Group IIB	13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 <b>P</b> 30.97	16 S 32.07	17 Cl 35.45	18 <b>Ar</b> 39.95
Period 4	19 <b>K</b> 39.10	20 Ca 40.08	21 <b>Sc</b> 44.96	22 Ti 47.87	23 V 50.94	24 Cr 52.00	25 <b>Mn</b> 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.93	28 <b>Ni</b> 58.69	29 Cu 63.55	30 <b>Zn</b> 65.38	31 <b>Ga</b> 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.92	34 Se 78.96	35 <b>Br</b> 79.90	36 <b>Kr</b> 83.80
5	37 <b>Rb</b> 85.47	38 <b>Sr</b> 87.62	39 <b>Y</b> 88.91	40 <b>Zr</b> 91.22	41 <b>Nb</b> 92.91	42 <b>Mo</b> 95.94	43 Tc (98)	44 <b>Ru</b> 101.07	45 <b>Rh</b> 102.91	46 <b>Pd</b> 106.42	47 <b>Ag</b> 107.87	48 Cd 112.41	49 <b>In</b> 114.82	50 Sn 118.71	51 <b>Sb</b> 121.76	52 <b>Te</b> 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.29
6	55 Cs 132.91	56 <b>Ba</b> 137.33	57 <b>La*</b> 138.91	72 <b>Hf</b> 178.49	73 <b>Ta</b> 180.95	74 W 183.84	75 <b>Re</b> 186.21	76 Os 190.23	77 <b>Ir</b> 192.22	78 <b>Pt</b> 195.08	79 <b>Au</b> 196.97	80 <b>Hg</b> 200.59	81 Tl 204.38	82 <b>Pb</b> 207.2	83 <b>Bi</b> 208.98	84 <b>Po</b> (209)	85 At (210)	86 Rn (222)
7	87 Fr (223)	88 Ra (226)	89 Ac (227)	104 Rf (261)	105 <b>Db</b> (262)	106 Sg (266)	107 <b>Bh</b> (264)	108 <b>Hs</b> (269)	109 Mt (268)	110 (271)	(272)	112 (277)		(289)		116 (289)		118 (293)
												Non- metals						
					58 Ce 140.12	59 <b>Pr</b> 140.91	60 <b>Nd</b> 144.24	61 <b>Pm</b> (145)	62 <b>Sm</b> 150.36	63 Eu 151.96	64 <b>Gd</b> 157.25	65 <b>Tb</b> 158.93	66 <b>Dy</b> 162.50	67 <b>Ho</b> 164.93	68 <b>Er</b> 167.26	69 <b>Tm</b> 168.93	70 <b>Yb</b> 173.04	71 <b>Lu</b> 174.97
					90 <b>Th</b> (232)	91 Pa (231)	92 U (238)	93 <b>Np</b> (237)	94 Pu (242)	95 <b>Am</b> (243)	96 <b>Cm</b> (248)	97 <b>Bk</b> (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 <b>Md</b> (260)	102 No (259)	103 Lr (262)