

Tema 7. Reacciones químicas.

Estequiometría



1. Reacción Química

1.1 A nivel macroscópico y microscópico

1.2 Clasificación

2. Estequiometría

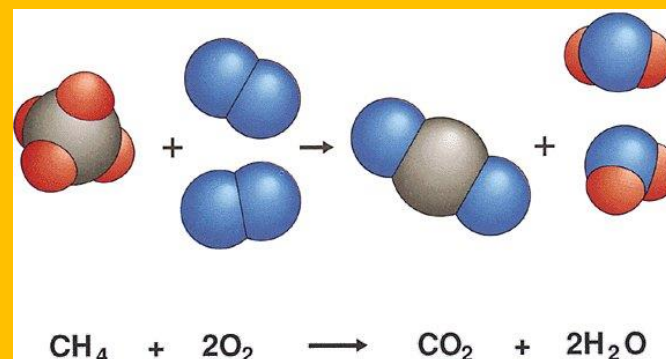
2.1 Ajuste de reacciones químicas

2.2 Interpretación macroscópica de reacciones químicas

2.3 Reactivo limitante

2.4 Rendimiento y grado de conversión de una reacción

2.5 Pureza de los reactivos





SUSTANCIAS PURAS

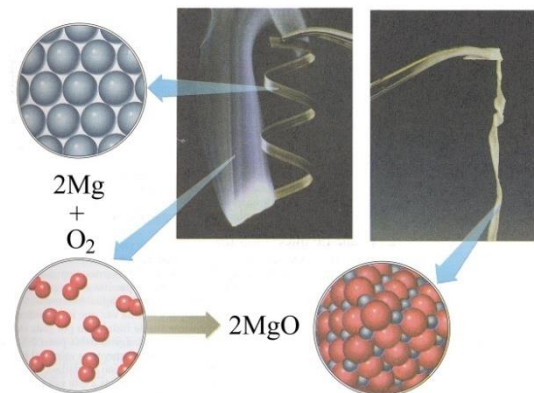
Cambios físicos

Cambios Químicos

TRANSFORMACIÓN

No implican cambio
de composición

Ej. Cambio de fase



REACCIONES QUÍMICAS

Para llegar a establecer la forma de medir la materia y las relaciones que existen entre **reactivos y productos**, se aplicó de manera intuitiva el método científico.



Reacción Química

Definición

Es un proceso en el cual una sustancia o sustancias originales (REACTIVOS) cambian para formar una o varias sustancias nuevas (PRODUCTOS).

Sustancias iniciales = **REACTIVOS** → Sustancias finales = **PRODUCTOS**

Observaciones que evidencian una reacción química (nivel macroscópico):

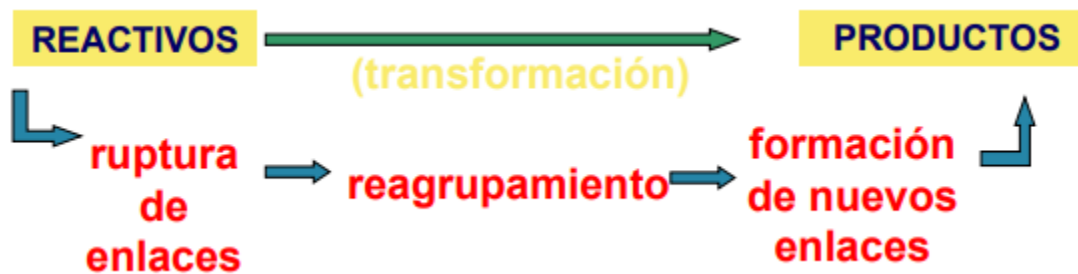
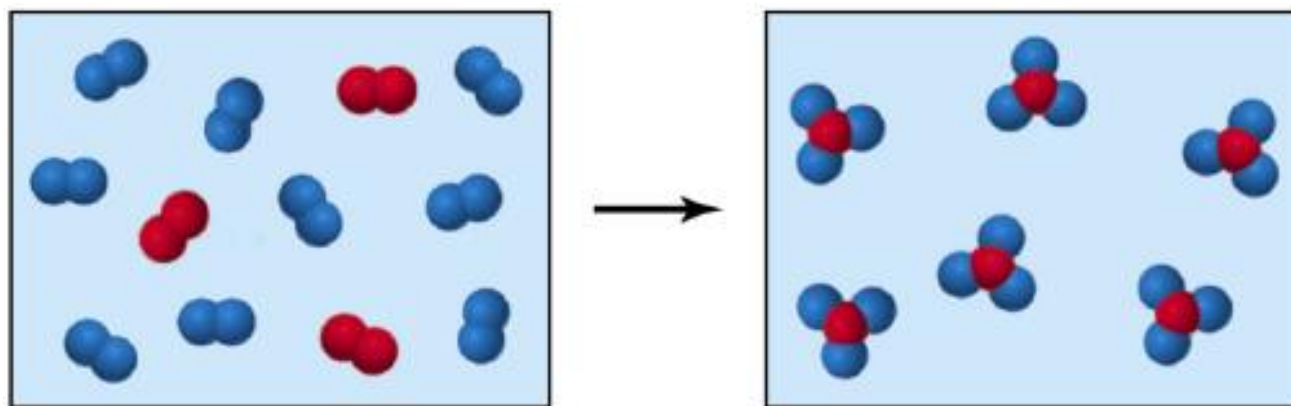
Cuando:

- Se produce un gas.
- Se produce un sólido insoluble.
- Se observa un cambio de color permanentemente.
- Se observa transferencia de calor.
 - Exotérmico – se libera calor.
 - Endotérmico – se absorbe calor.





A nivel microscópico....



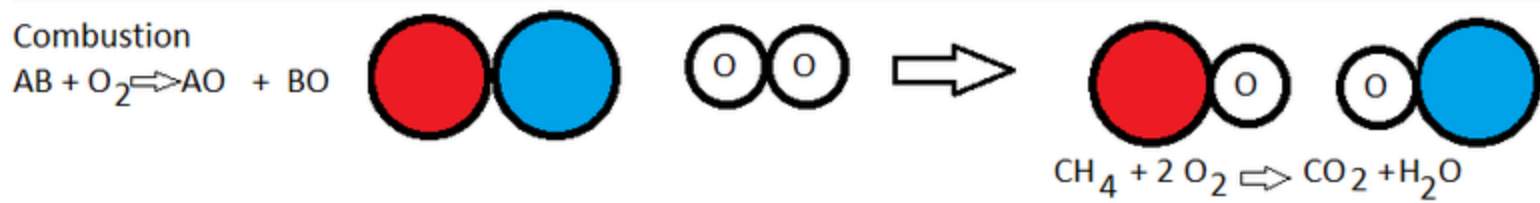


Clasificaciones de las reacciones químicas:





Tipos de reacciones químicas (**transformación**):



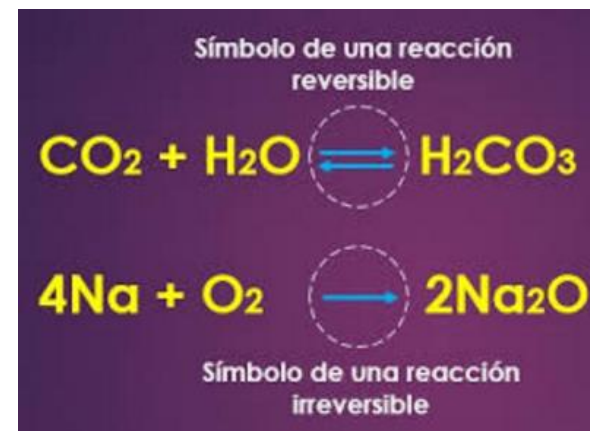


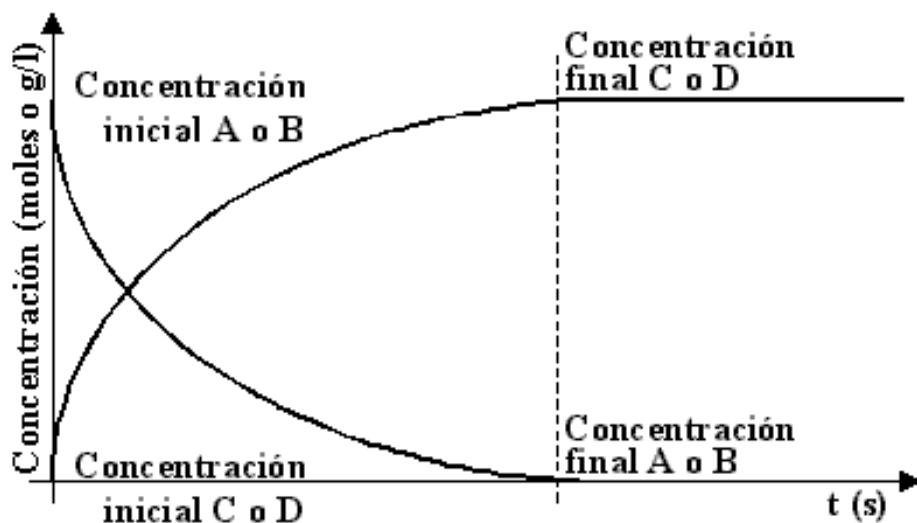
Reacciones Reversibles e Irreversibles

- Una reacción es reversible cuando los productos vuelven a ser nuevamente reactivos se representa con una doble flecha



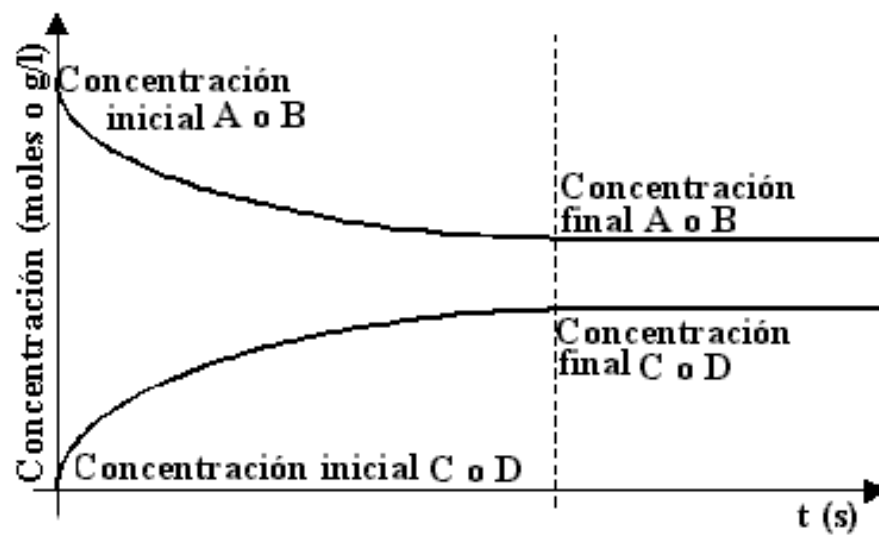
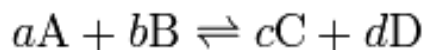
- Una reacción es irreversible cuando los reactivos se transforman en productos y estos no pueden volver a ser reactivos y se representa con una flecha en un solo sentido





Reacción Irreversible

Reacción Reversible





Estequiometría y cálculos estequiométricos

Estequiometría

Stoecheion
Elemento

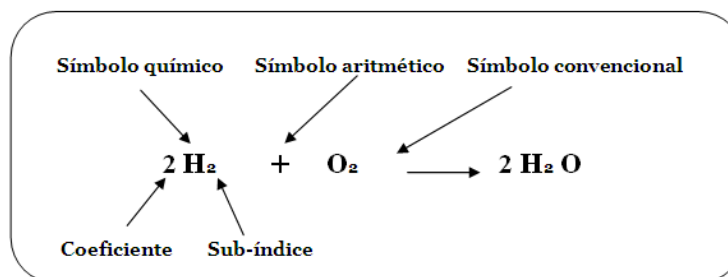
Metron
Medida

Cálculos
estequiométricos

cantidades de sustancia que reaccionan
cantidades de sustancia que se producen



Una ecuación química indica de forma simbólica los cambios que tienen lugar en una reacción química. Presentan la siguiente forma:



■ Una **ecuación química** debe contener:

- Todos los reactivos
- Todos los productos
- El estado físico de las sustancias
- Las condiciones de la reacción

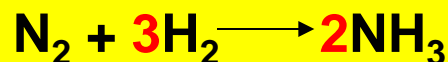
permite conocer las sustancias que intervienen en el proceso químico y la proporción en la que lo hacen

Pasos para escribir correctamente una ecuación química:

- 1) **Formular** adecuadamente los reactivos y los productos.
- 2) Indicar el **estado de agregación** (s, l, g, ac..)
- 3) **Ajustar** la reacción química

En toda reacción química se cumple el principio de conservación de la masa y el principio de conservación de las cargas eléctricas, para ello, la reacción química debe estar **AJUSTADA**

*Una ecuación química está ajustada si se conserva el nº de átomos en los dos miembros de la ecuación. Para ajustarla se utilizan los **coeficientes estequiométricos***



Si **intervienen iones**, deben ajustarse de forma que la carga neta sea la misma en los dos miembros



Importante!



- Se llama **ajuste** a la averiguación del número de moles de reactivos y productos.
- ¡**CUIDADO!** En el ajuste nunca pueden cambiarse los subíndices de las fórmulas de reactivos o productos.
- **Métodos de ajuste:**
 - **Tanteo** (en reacciones sencillas).
 - **Algebraicamente** (en reacciones más complejas) resolviendo un sistema de ecuaciones.



Balance de ecuaciones químicas

1. Escriba la fórmula(s) **correcta** para los reactivos en el lado izquierdo y la fórmula(s) **correcta** para el producto(s) en el lado derecho de la ecuación.

El etano reacciona con el oxígeno para formar dióxido de carbono y agua



2. Cambie los números delante de las fórmulas (los **coeficientes**) para hacer el número de átomos de cada elemento el mismo en ambos lados de la ecuación. No cambie los subíndices.



NO





3. Empezé balanceando esos elementos que aparecen sólo en un reactivo y un producto.



empezé con C o H pero no O

2 carbonos
en la izquierda

1 carbono
en la derecha

multiplicar CO_2 por 2



6 hidrógenos
en la izquierda

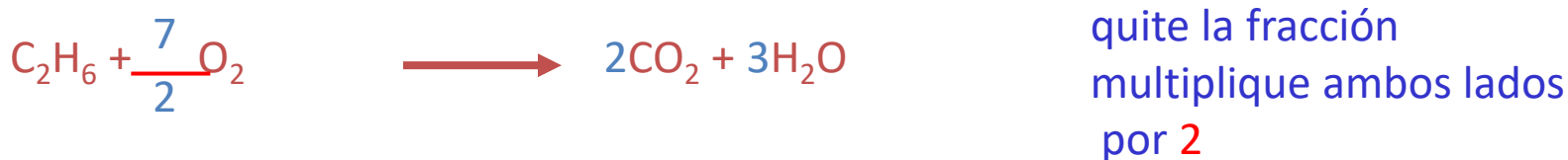
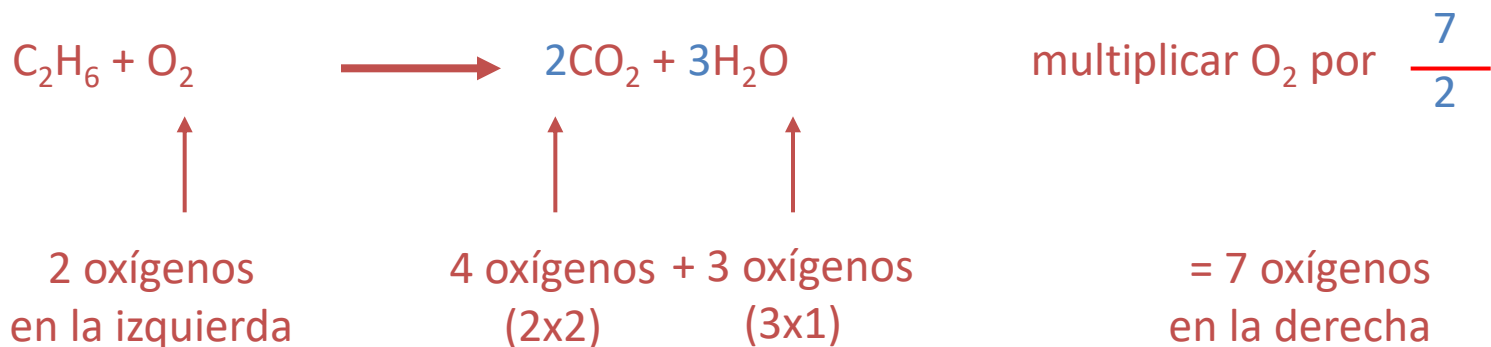
2 hidrógenos
en la derecha

multiplicar H_2O por 3



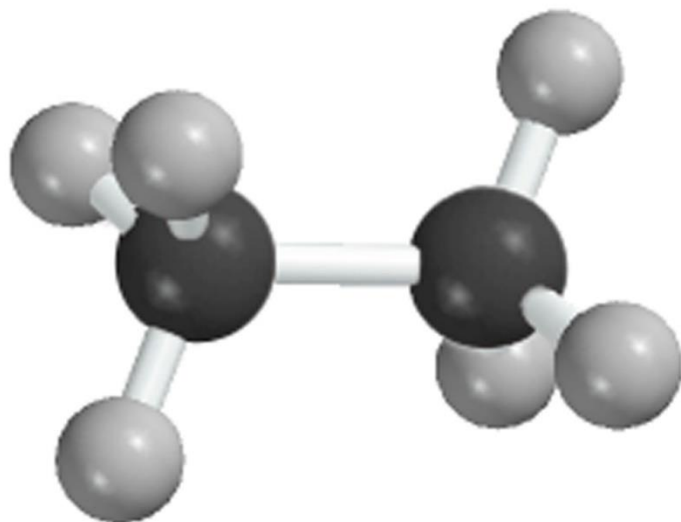
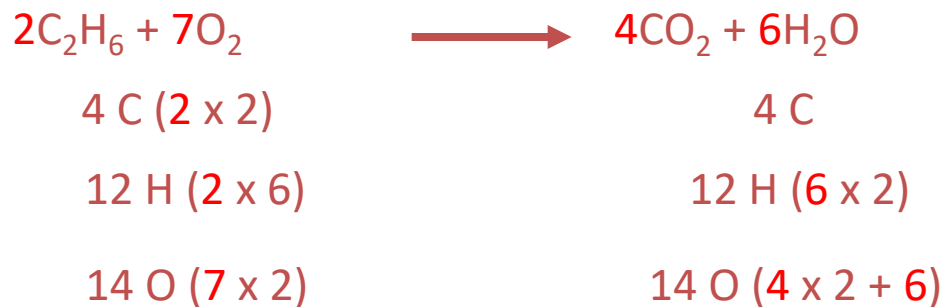


4. Balancee esos elementos que aparecen en dos o más reactivos o productos.





5. Verifique para asegurarse de que tiene el mismo número de cada tipo de átomo en ambos lados de la ecuación.

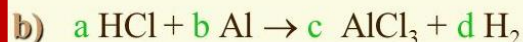


Reactivos	Productos
4 C	4 C
12 H	12 H
14 O	14 O



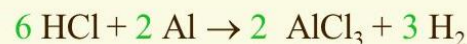
K) $a = b$; Cl) $a = b$; O) $3a = 2c$

Sea $a = 2$. Entonces $b = 2$ y $c = (3 \cdot 2) / 2 = 3$

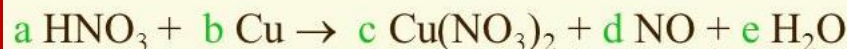


H) $a = 2d$; Cl) $a = 3c$; Al) $b = c$

Sea $c = 2$. Entonces $b = 2$, $a = 3 \cdot 2 = 6$ y $d = 6 / 2 = 3$



Ejemplos método algebraico:



H) $a = 2e$; N) $a = 2c + d$; O) $3a = 6c + d + e$; Cu) $b = c$

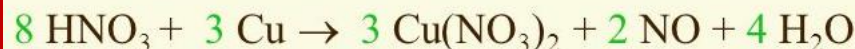
Sea $c = 1$. Entonces $b = 1$ y el sistema queda:

$$a = 2e; \quad a = 2 + d; \quad 3a = 6 + d + e;$$

Sustituyendo a : $2e = 2 + d$; $6e = 6 + d + e$

Sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas que resolviendo queda: $e = 4/3$; $d = 2/3$ con lo que $a = 8/3$

Multiplicando todos los coeficientes por 3:



Comprobamos el nº de átomos de cada tipo antes y después de la reacción: 8 átomos de H ($4 \cdot 2$), 8 de N ($2 \cdot 3 + 2$), 24 de O ($8 \cdot 3 = 3 \cdot 2 \cdot 3 + 2 + 4$) y 3 de Cu



¿Qué significa esta ecuación?



Micro-

1 molécula de nitrógeno (con 2 átomos) reacciona con

3 moléculas de hidrógeno (con 2 átomos) para formar:

2 moléculas de amoníaco (Cada molécula contiene 1 átomo de N y 3 átomos de H)

Macro-

1 mol de nitrógeno (N₂) reacciona con

3 moles de hidrógeno (H₂) para formar:

2 moles de amoníaco (NH₃)



INTERPRETACIÓN MACROSCÓPICA (relación en moles)

Los coeficientes estequiométricos informan sobre el número de moles de cada elemento y de cada compuesto que intervienen en la reacción.



+



2 moléculas de CO

1 molécula de O₂

2 moléculas de CO₂

20 moléculas de CO

10 molécula de O₂

20 moléculas de CO₂

$2 \cdot 6,022 \cdot 10^{23}$
moléculas de CO

$6,022 \cdot 10^{23}$ moléculas
de O₂

$2 \cdot 6,022 \cdot 10^{23}$
moléculas de CO₂

2 moles de CO

1 mol de O₂

2 moles de CO₂

Los coeficientes estequiométricos de una ecuación química ajustada informan de la proporción entre moles de reactivos y productos



INTERPRETACIÓN MACROSCÓPICA (relación en masas)

A partir de las masas atómicas de los elementos que intervienen en la reacción, se puede establecer la relación entre las masas de los reactivos y de los productos



Conociendo las masas atómicas ($\text{H} = 1,01 \text{ u}$ y $\text{N} = 14,01 \text{ u}$), se determinan las masas moleculares: $\text{H}_2 = 2,02 \text{ u}$; $\text{N}_2 = 28,02 \text{ u}$; $\text{NH}_3 = 17,04 \text{ u}$

1 mol de N_2

28,02 g de N_2

3 moles de H_2

$3 \cdot 2,02 = 6,06 \text{ g de H}_2$

2 moles de NH_3

$2 \times 17,04 = 34,08 \text{ g de NH}_3$

Los coeficientes estequiométricos de una ecuación química ajustada informan de la proporción entre gramos de reactivos y productos

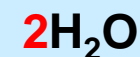
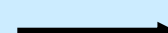


INTERPRETACIÓN MACROSCÓPICA (relación en volúmenes)

Si en la reacción intervienen gases en c.n. de presión y temperatura, 1 mol de cualquiera de ellos ocupará un volumen de 22,4 litros



+



2 moles de H_2

$2 \cdot 22,4$ litros de H_2

1 mol de O_2

22,4 litros de O_2

2 moles de H_2O

$2 \cdot 22,4$ litros de H_2O



Hidrógeno

+



Oxígeno



Agua (vapor)

Los coeficientes estequiométricos de una ecuación química ajustada en la que intervienen gases, informan de la proporción entre volúmenes de reactivos y productos



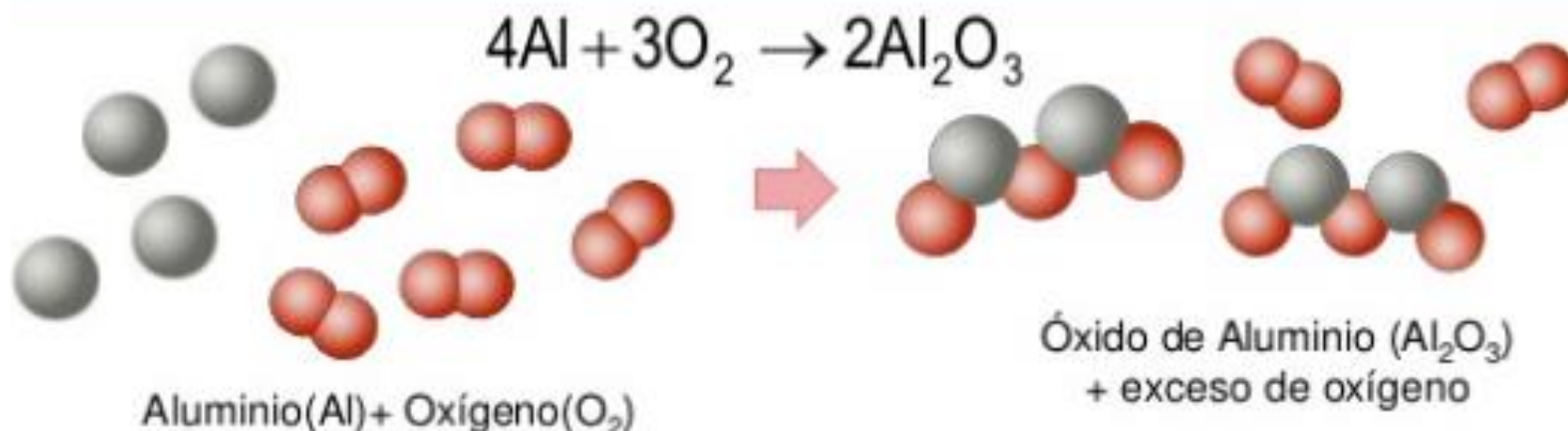
Reacciones con más de un reactivo.

Concepto de reactivo limitante

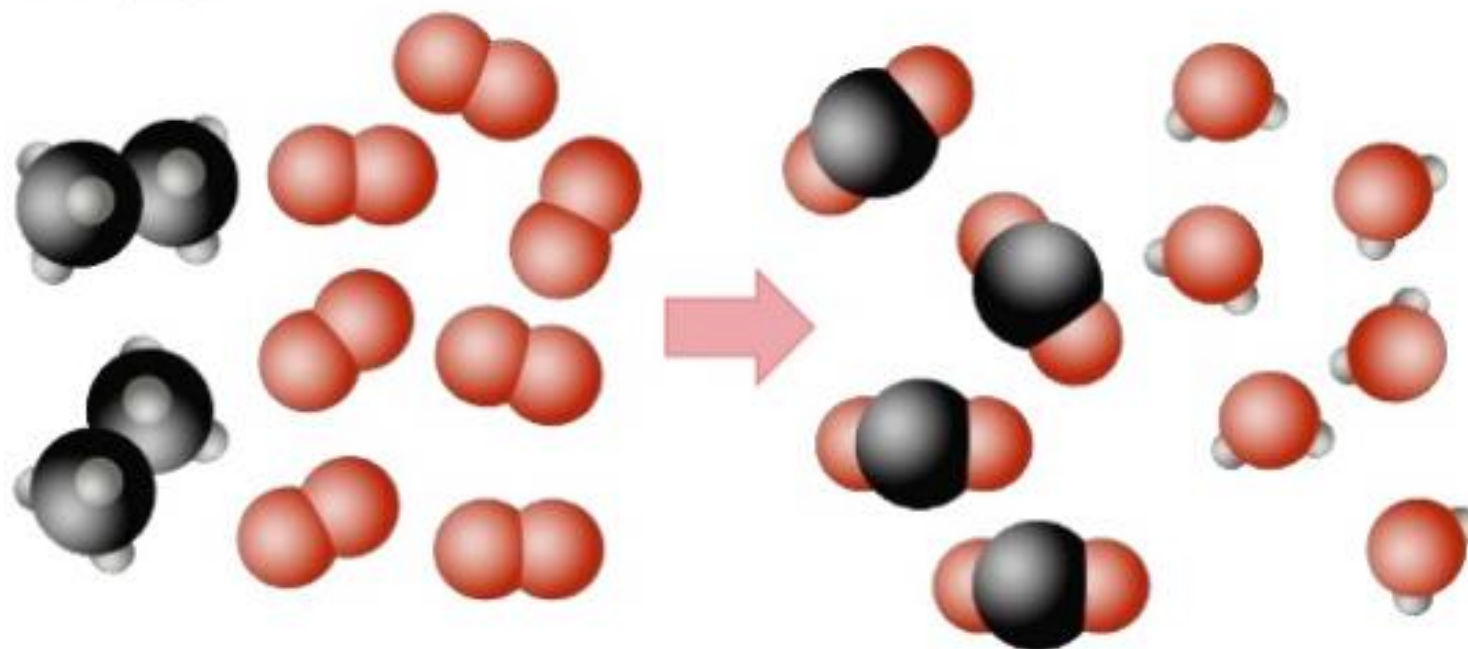
Cuando una reacción se detiene porque se acaba uno de los reactivos, a ese reactivo se le llama **reactivo limitante**.

Aquel reactivo que se ha consumido por completo en una reacción química se le conoce con el nombre de reactivo limitante pues determina o limita la cantidad de producto formado.

Reactivo limitante es aquel que se encuentra en **defecto** basado en la **ecuación química ajustada**.



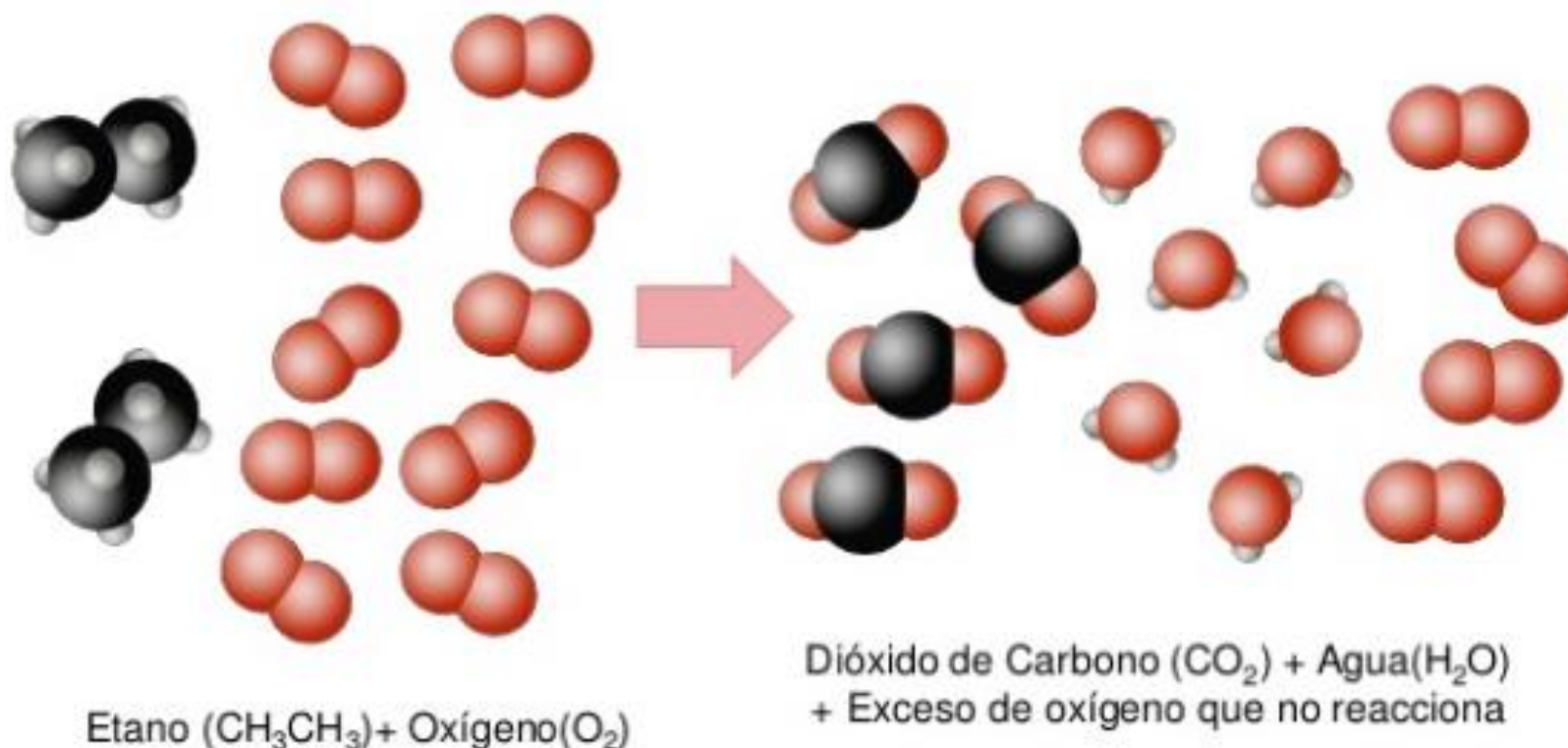
La siguiente reacción es completa ya que todos los átomos de los reactivos se combinan y se forman productos. **No** existe en este caso **reactivo limitante**.



Etano (CH_3CH_3) + Oxígeno (O_2)

Dióxido de Carbono (CO_2) + Agua (H_2O)

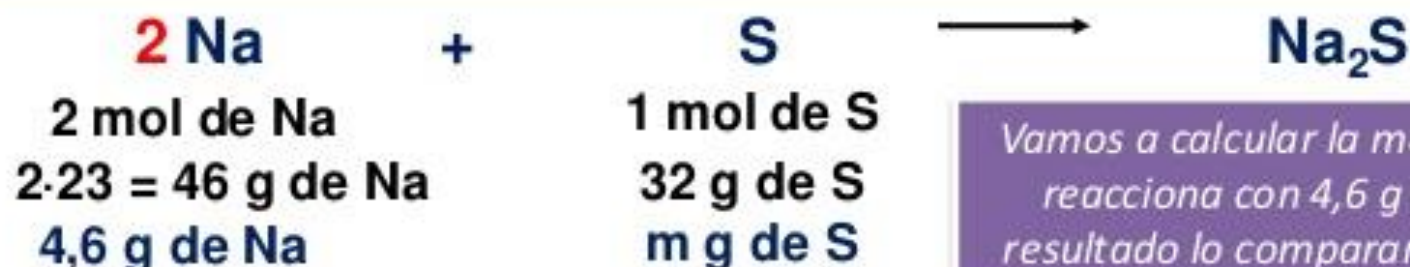
En el caso de que hubiese oxígeno en exceso(más del necesario) solo reaccionará en proporción al etano presente y el resto quedará como tal. Es el siguiente caso, reacciona el etano con el oxígeno pero no hay etano suficiente para reaccionar con todo...el etano es el reactivo limitante





CÁLCULOS CON REACTIVO LIMITANTE.

Hacemos reaccionar 4,6 g de Na (23 u) con 4 g de S (32 u) para formar Na_2S .
¿Cuál es el reactivo limitante y cuál el excedente?



Vamos a calcular la masa de S que reacciona con 4,6 g de Na y el resultado lo comparamos con 4 g.

$$\frac{32 \text{ (g de S)}}{46 \text{ (g de Na)}} = \frac{m \text{ (g de S)}}{4,6 \text{ (g de Na)}} \rightarrow m = \frac{32 \cdot 4,6}{46} = 3,2 \text{ g de S}$$

Hemos averiguado que con 4,6 g de Na reaccionan 3,2 g de S, pero como de S había 4 g, se deduce:

reactivo limitante: **Na**
reactivo en exceso: **S**



IMPORTANTE:

Todos los cálculos se deben realizar con el reactivo limitante (RL)



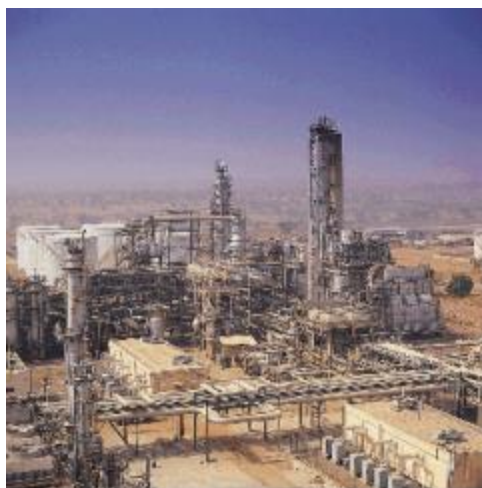
Rendimiento de una reacción

Lo más frecuente es que **en la realidad** nunca se obtenga la cantidad de producto que permite deducir la estequiometría de la reacción, sino una cantidad que siempre es **menor** que la calculada.

$$\text{Rendimiento} = \frac{\text{Producto-real-obtenido}}{\text{Producto-teórico-obtenible}}$$

O expresado en tanto por ciento:

$$\text{Rendimiento}\% = \frac{\text{Producto-real-obtenido}}{\text{Producto-teórico-obtenible}} \times 100$$



hay que calcular el **RENDIMIENTO** de las reacciones químicas

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

El rendimiento de las reacciones es un factor fundamental en la industria química



GRADO DE
CONVERSIÓN DE
UN REACTIVO



Se refiere al reactivo limitante

La **Conversión** es el número de moles desaparecidos de un reactivo en la reacción por cada mol inicial de dicho reactivo (N_{A0})

$$x_A = \frac{n_{A,0} - n_{A,f}}{n_{A,0}} \quad 0 \leq x_A \leq 1$$

Ejemplo:



1,5 mol	2 mol	0 mol	0 mol	INICIO
0,015 mol	0,515 mol	1,485 mol	1,485 mol	FINAL

$$x_A = 0,99$$



Pureza de los Reactivos

Por regla general, todas las sustancias presentan un grado de impureza.

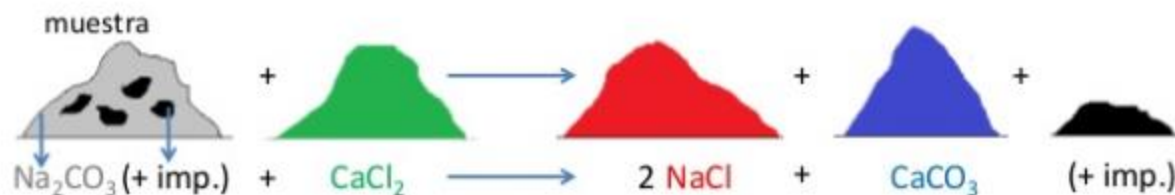
A la hora de resolver un caso práctico aplicando los cálculos estequiométricos convenientes, nunca debe tomarse la cantidad total de la muestra que se da (a no ser que su pureza sea del 100%), sino la parte que corresponda al reactivo puro.

$$\text{Pureza} = (\text{Masa real} / \text{Masa total}) \cdot 100$$



pura

pura + impura





PROBLEMA CLÁSICO DE ESTEQUIOMETRÍA

El sulfuro de hierro(II) (pirita) se calcina (reacciona con el oxígeno) dando lugar a óxido férrico (sólido) y dióxido de azufre (g):

1. Escribir la reacción ajustada.
2. Calcular el volumen de aire (medido en CN) que se necesita para calcinar una tonelada de pirita del 60% de riqueza en sulfuro de hierro(II).
3. Determinar la cantidad de oxígeno que entraría si se utiliza un exceso de aire del 20%.
4. Determinar la cantidad de dióxido de azufre gas que se forma en la calcinación de la tonelada de pirita.

Datos: Suponga que el aire está formado por un 21% de oxígeno y un 79% de nitrógeno en peso.

Masas atómicas S: 32; Fe: 55,8



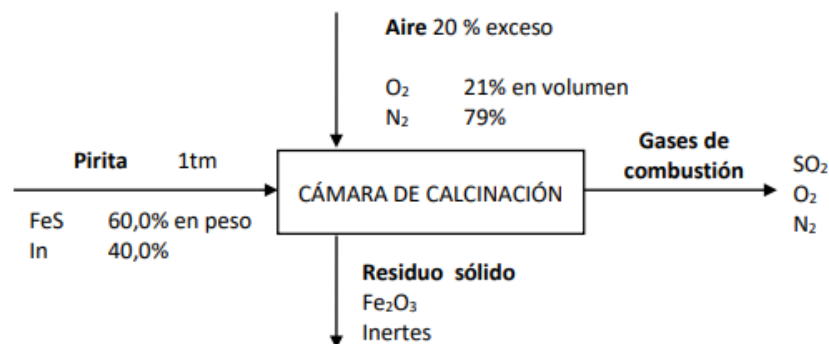
PROBLEMA DE BALANCE DE MATERIA

Una pirita natural contiene un mineral de composición FeS, con una riqueza del 60% en peso, siendo el resto inertes. La pirita se calcina con aire (empleando un exceso del 20%) para producir óxido férrico (sólido) y dióxido de azufre (gas).

Calcule el volumen de aire (en CN) que se necesita por tonelada de pirita natural y la composición del gas de salida del reactor (en % en volumen).

Datos: Composición del aire (en % en volumen): O₂: 21; N₂: 79.

Masas atómicas: S: 32,0; Fe: 55,8 g/mol.





REACTIVOS CON IMPUREZAS

Si existen reactivos con impurezas, es necesario determinar primero las cantidades existentes de sustancia pura

Ejemplo: Se hacen reaccionar 22,75 g de Zn que contiene un 7,25 % de impurezas con HCl suficiente. Calcula la masa de H₂ desprendida.
Dato: masa atómica del Zn = 65,38



$$\frac{100 \text{ g de muestra}}{22,75 \text{ g}} = \frac{(100 - 7,25) \text{ g de Zn}}{X} \quad \Rightarrow \quad X = 21,1 \text{ g de Zn puro}$$

Por cada mol de Zn se obtiene 1 mol de H₂

$$\frac{65,38 \text{ g de Zn}}{21,1 \text{ g de Zn}} = \frac{2 \text{ g de H}_2}{Y} \quad \Rightarrow \quad Y = 0,645 \text{ g de H}_2$$



**CÁLCULOS EN REACCIONES
SUCEVAS**

En reacciones sucesivas, el producto de la 1ª puede ser el reactivo de la 2ª, estableciéndose las sucesivas proporciones estequiométricas, en las que el resultado de la 1ª es dato de la 2ª

Ejemplo: ¿Qué cantidad de CaC_2 se gastará en producir el acetileno (C_2H_2) necesario para obtener por combustión 10 litros de CO_2 en condiciones normales?



Los moles de CO_2 : $\frac{1 \text{ mol de } \text{CO}_2}{22,4 \text{ litros}} = \frac{n}{10 \text{ litros}} \Rightarrow n = 0,44 \text{ moles de } \text{CO}_2$

Los moles de C_2H_2 : $\frac{2 \text{ mol de } \text{C}_2\text{H}_2}{4 \text{ mol de } \text{CO}_2} = \frac{n'}{0,44 \text{ mol de } \text{CO}_2} \Rightarrow n' = 0,22 \text{ moles de } \text{C}_2\text{H}_2$

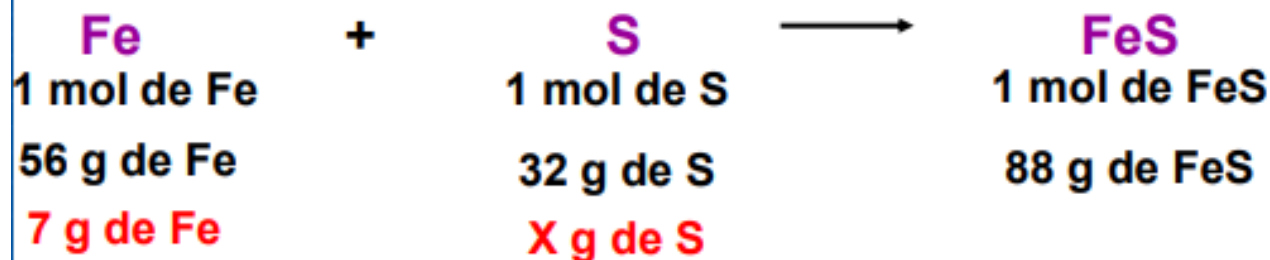


$\frac{1 \text{ mol de } \text{CaC}_2}{1 \text{ mol de } \text{C}_2\text{H}_2} = \frac{x}{0,22 \text{ mol de } \text{C}_2\text{H}_2} \Rightarrow x = 0,22 \text{ moles de } \text{CaC}_2$



**CÁLCULOS CON
REACTIVO
LIMITANTE**

Ejemplo: Si reaccionan 7 g de Fe (56 g/mol) con 8 g de S (32g/mol) para formar FeS ¿cuál es el reactivo limitante y cuál el excedente?



$$\frac{7 \text{ (g de Fe)}}{56 \text{ (g/mol)}} = \frac{X \text{ (g de S)}}{32 \text{ (g/mol)}} \Rightarrow X = \frac{32 \cdot 7}{56} = 4 \text{ g de S}$$

reactivo limitante: **Fe**

reactivo en exceso: **S**

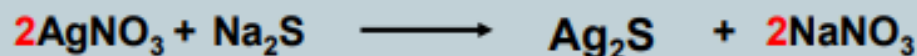


**CÁLCULOS CON
REACTIVOS
DISUELTOS**

En estos casos es necesario calcular las cantidades de dichos reactivos disueltos

Ejemplo: Calcular el volumen de la disolución 0,1 M de AgNO_3 que se necesita para reaccionar exactamente con 100 cm^3 de Na_2S 0,1 M. (Masas moleculares: $\text{AgNO}_3 = 169,88 \text{ u}$; $\text{Na}_2\text{S} = 78 \text{ u}$)

La reacción ajustada



En 100 cm^3 de d^{on} 0,1 M de Na_2S hay: $0,1 \text{ (L)} \times 0,1 \text{ (mol/L)} = 0,01 \text{ moles de } \text{Na}_2\text{S}$

Por cada mol de Na_2S que reacciona se necesitan 2 moles de AgNO_3 :

$$\frac{1 \text{ (mol } \text{Na}_2\text{S})}{2 \text{ (mol } \text{AgNO}_3)} = \frac{0,01 \text{ (mol } \text{Na}_2\text{S})}{x} \Rightarrow x = 0,02 \text{ moles de } \text{AgNO}_3$$

La cantidad de disolución que hay que tomar para conseguir esos 0,02 moles de AgNO_3 es:

$$\frac{0,1 \text{ (mol)}}{1 \text{ (L)}} = \frac{0,02 \text{ (mol)}}{y} \Rightarrow y = 0,2 \text{ L} = 200 \text{ cm}^3$$

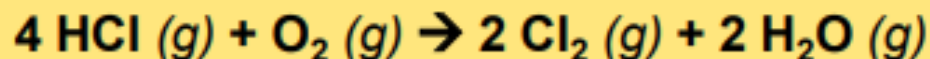


CÁLCULOS CON RENDIMIENTO DE REACCIÓN

hay que calcular el **RENDIMIENTO**
de las reacciones químicas

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

EJEMPLO: El proceso Deacon para producción de cloro se basa en un catalizador que activa la oxidación del ácido clorhídrico gaseoso seco con aire, de acuerdo con la siguiente reacción:



Cuando la reacción se lleva a cabo a 723 K y se utiliza aire con un 20% en exceso, se alcanzan conversiones del 65%. Calcular para estas condiciones:

- La composición de la corriente de entrada al reactor.
- La composición de la corriente de salida del reactor.



1. Elegimos una base de cálculo \rightarrow 4 moles de HCl

2.

	entrada	reacción	salida
HCl	4	$-4 \cdot 0,65 = -2,6$	$4 - 2,6 = 1,4$
O ₂	$1 \cdot (1 + 0,2) = 1,2$	$-1 \cdot 0,65 = -0,65$	$1,2 - 0,65 = 0,55$
N ₂	$1,2 \cdot 79/21 = 4,51$	0	$4,51 + 0$
Cl ₂	0	$2 \cdot 0,65 = 1,3$	$0 + 1,3$
H ₂ O	0	$2 \cdot 0,65 = 1,3$	$0 + 1,3$

	entrada	reacción	salida
HCl	4	$-4 \cdot 0,65 = -2,6$	$4 - 2,6 = 1,4$
O ₂	$1 \cdot (1 + 0,2) = 1,2$	$-1 \cdot 0,65$	$1,2 - 0,65 = 0,55$
N ₂	$1,2 \cdot 79/21 = 4,51$	0	4,51
Cl ₂	0	$2 \cdot 0,65 = 1,3$	1,3
H ₂ O	0	$2 \cdot 0,65 = 1,3$	1,3

Total moles entrada: $4 + 1,2 + 4,51 = 9,71$

Total moles salida: $1,4 + 0,55 + 4,51 + 1,3 + 1,3 = 9,06$

	Composición entrada	Composición salida
HCl	$4 \cdot 100/9,71 = 41,19\%$	$1,4 \cdot 100/9,06 = 15,45\%$
O ₂	$1,2 \cdot 100/9,71 = 12,36\%$	$0,55 \cdot 100/9,06 = 6,07\%$
N ₂	$4,51 \cdot 100/9,71 = 46,45\%$	$4,51 \cdot 100/9,06 = 49,78\%$
Cl ₂	0%	$1,3 \cdot 100/9,06 = 14,35\%$
H ₂ O	0%	$1,3 \cdot 100/9,06 = 14,35\%$