

Copyright © 2013 John Smith

PUBLISHED BY PUBLISHER

BOOK-WEBSITE.COM

Licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 3.0 Unported License (the "License"). You may not use this file except in compliance with the License. You may obtain a copy of the License at http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0. Unless required by applicable law or agreed to in writing, software distributed under the License is distributed on an "AS IS" BASIS, WITHOUT WARRANTIES OR CONDITIONS OF ANY KIND, either express or implied. See the License for the specific language governing permissions and limitations under the License.

First printing, March 2013



Formulación Química

	Formulacion en Quimica Inorganica	. 9
1.1	Introducción	9
1.2	Sistemas de Nomenclatura	9
1.2.1	Nomenclatura de Composición	
1.2.2	Nomenclatura de Sustitución	
1.2.3	Nomenclatura de Adición	10
1.3	Tipos de Nomenclatura más utilizados	10
1.4	Número de Oxidación y Valencia	11
1.5	Sustancias Binarias	11
1.5.1	Formulación General de Sustancias Binarias	11
1.5.2	Óxidos	12
1.5.3	Peróxidos	12
1.5.4	Hidruros Metálicos	
1.5.5	Hidruros No Metálicos	
1.5.6	Sales Binarias Metal-No Metal	
1.5.7	Sales Binarias No Metal-No metal	
1.5.8	Hidrácidos	14
1.6	Sustancias Ternarias (I): Hidróxidos Metálicos y Oxoácidos	14
1.6.1	Hidróxidos Metálicos	14
1.6.2	Oxoácidos	15
1.6.3	Oxoácidos de Interés Especial	16
1.7	lones	17
1.7.1	Cationes Monoatómicos	17

1.7.2 1.7.3	Cationes Homopoliatómicos	
1.8	Sustancias Ternarias (II): Oxisales	18
1.9	Sustancias Cuaternarias: Oxisales Ácidas	19
1.10	Problemas	21
- II	Herramientas Químicas	
2	Química Cuantitativa	25
2.1	Introducción	25
2.2	Leyes Ponderales	25
2.2.1 2.2.2 2.2.3 2.2.4	Ley de la Conservación de la Masa (Ley de Lavoisier)	26 26
2.3	Teoría Atómica de Dalton	27
2.4	Leyes Volumétricas	28
2.4.1 2.4.2	Ley de los Volúmenes de Combinación de Gay-Lussac	28 28
2.5	Concepto de Mol	29
2.6	Concepto de Equivalente	30
2.7	Modelo del Gas Ideal	31
2.7.1 2.7.2	Ecuación de Estado de los Gases Ideales	
2.8	Análisis Elemental y Composición Centesimal	32
2.8.1	Análisis Elemental por Combustión	33
2.9	Disoluciones	34
2.9.1 2.9.2	Formas de Expresar la Concentración	
2.10	Estequiometría	37
2.10.1	•	37
	·	
	Reactivo Limitante y Reactivo en Exceso	
2.10.5	Rendimiento de una Reacción Química	
2.11	Problemas	41
3	Termodinámica Química	45
3.1	Introducción	45
3.2	Termoquímica	45
3.3	Sistema Termodinámico	46
3.4	Variables de Estado	46
3.5	Primer Principio de la Termodinámica	47
3.5.1	Concepto de Trabajo Termodinámico	47

3.5.2 3.5.3 3.5.4	Energía Interna	48
3.6	Concepto de Entalpía	49
3.7	Entalpía Estándar de Reacción: Diagramas Entálpicos	49
3.8	Cálculo de Entalpías de Reacción	50
3.8.1 3.8.2 3.8.3	Entalpías Estándas de Formación	51
3.9	Segundo Principio de la Termodinámica	53
3.9.1 3.9.2 3.9.3 3.9.4	Insuficiencia del Primer Principio	53 53
3.10	Tercer Principio de la Termodinámica	55
3.10.1 3.10.2	Tercer Prinncipio de la Termodinámica	
3.11	Espontaneidad de las Reacciones Químicas	55
3.11.1 3.11.2	Cálculo de Energías Libres de Gibbs	
3.12	Problemas	57
3.13	Citation	57
3.14	Lists	57
3.14.1 3.14.2 3.14.3	Numbered List Bullet Points Descriptions and Definitions	58
4	In-text Elements	59
4.1	Theorems	59
4.1.1 4.1.2		59 59
4.2	Definitions	59
4.3	Notations	60
4.4	Remarks	60
4.5	Corollaries	60
4.6	Propositions	60
4.6.1 4.6.2	Several equations	
4.7	Examples	60
4.7.1 4.7.2	Equation and Text	
4.8	Exercises	61
4.9	Problems	61
4.10	Vocabulary	61

Ш	Part Two	
5	Presenting Information	65
5.1	Table	65
5.2	Figure	65
	Index	67

Formulación Química

Formulación en Química Inorgánica 9
Introducción
Sistemas de Nomenclatura
Tipos de Nomenclatura más utilizados
Número de Oxidación y Valencia
Sustancias Binarias
Sustancias Ternarias (I): Hidróxidos Metálicos y
Oxoácidos
lones
Sustancias Ternarias (II): Oxisales
Sustancias Cuaternarias: Oxisales Ácidas

1.10

Problemas



1.1 Introducción

Desde los primeros albores de las ciencias químicas, los científicos han buscado un método de nomenclatura capaz de representar y reflejar la complejidad y diversidad de la materia que forma el mundo físico que nos rodea. Así, partiendo de los primeros trabajos al respecto del científico inglés *J. Dalton* (1766-1844) los sistemas de nomenclatura han ido evolucionando a la par que la propia química, e igual que cualquier lengua, se han adaptado a los nuevos cambios y descubrimientos, y a la manera en que los propios químicos han desarrollado una ciencia con poco mas de 200 años de historia.

En 1919 se crea la *International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC)* como organismo internacional para, entre otros cometidos, establecer estándares globales de simbología y protocolos operacionales en química. Por tanto, hoy en día la IUPAC es la máxima autoridad en materia de nomenclatura química, y es la encargada de revisar e introducir los cambios pertinentes en los distintos sistemas según el desarrollo natural de la propia ciencia.

La última revisión de los protocolos de nomenclatura y formulación tuvo lugar en el año 2005, y fueron publicados, para el caso de la formulación inorgánica, en el "Libro Rojo de la IUPAC" de 2007. Este capítulo contiene todas las nuevas modalidades de nomenclatura y formulación. que incluyen cambios radicales en la manera de nombrar oxoácidos, oxisales y oxoaniones. Como todos los cambios de especial envergadura en ciencia requieren de un periodo de adaptación, se han incluido en los anexos la nomenclatura de dichas especies mediante los sistemas anteriores a las recomendaciones de 2005, de forma que el alumno pueda comprenderlos en el caso de que alguna publicación todavía los contenga.

1.2 Sistemas de Nomenclatura

En el desarrollo de la nomenclatura química han surgido varios sistemas para la construcción de los nombres de los elementos y compuestos químicos. Cada uno de los sistemas tiene su propio conjunto de reglas. Algunos sistemas son de aplicación general; en cambio, otros han surgido

de la necesidad de usar sistemas más especializados en áreas determinadas de la química. En concreto, en lo referente a la química inorgánica, tres son los sistemas principales de nomenclatura: la nomenclatura de composición, la de sustitución y la de adición. La nomenclatura de adición es quizás la que puede usarse de forma más generalizada en química inorgánica. La nomenclatura de sustitución puede usarse en determinadas áreas. Estos dos sistemas requieren el conocimiento de la estructura de las especies químicas que van a ser nombradas. En cambio, la nomenclatura de composición puede usarse cuando no es necesario aportar información sobre la estructura de las sustancias, o no se conoce, y sólo se indica la estequiometría o composición.

1.2.1 Nomenclatura de Composición

Esta nomenclatura está basada en la composición no en la estructura. Por ello, puede ser la única forma de nombrar un compuesto si no se dispone de información estructural.

El tipo más simple de este tipo de nomenclatura es la llamada estequiométrica. En ella se indica la proporción de los constituyentes a partir de la fórmula empírica o la molecular. La proporción de los elementos o constituyentes puede indicarse de varias formas:

- Utilizando prefijos multiplicativos (Método Sistemático).
- Utilizando números de oxidación de los elementos (Sistema de Stock, mediante números romanos).
- Utilizando la carga de los iones (mediante los números de Ewens-Basset, números arábigos seguido del signo correspondiente)

1.2.2 Nomenclatura de Sustitución

De forma general, en esta nomenclatura se parte del nombre de unos compuestos denominados Hidruros Parentales y se indica, junto con los prefijos de cantidad correspondientes, el nombre de los elementos o grupos que sustituyen a los hidrógenos. Esta nomenclatura es la usada generalmente para nombrar los compuestos orgánicos.

1.2.3 Nomenclatura de Adición

Esta nomenclatura se desarrolló originalmente para nombrar los compuestos de coordinación. Así, se considera que el compuesto consta de un átomo central o átomos centrales con ligandos asociados, cuyo número se indica con los prefijos multiplicativos correspondientes.

Los tres sistemas de nomenclatura pueden proporcionar nombres diferentes, pero sin ambigüedades, para un compuesto dado. La elección entre los tres sistemas depende de la clase de compuesto inorgánico que se trate y el grado de detalle que se desea comunicar.

1.3 Tipos de Nomenclatura más utilizados

A continuación pasaremos a detallar los tipos de nomenclatura mas empleados en Química Inorgánica, independientemente que estos sistemas sean de Composición, Sustitución o Adición

- Nomenclatura de Stock Se nombra el compuesto seguido de la valencia del elemento central entre paréntesis y en números romanos, si hiciera falta.
- omenclatura Sistemática Se nombra la fórmula del compuesto químico utilizando prefijos para nombrar los subíndices de la fórmula. Dichos prefijos son:
 - Nomenclatura Tradicional La Nomenclatura Tradicional es un tipo de nomenclatura en desuso, aunque se sigue utilizando masivamente en Oxoácidos, Oxisales y Oxisales Ácidas.

Prefijo	Cantidad	Prefijo	Cantidad
mono-	1	hexa-	6
di-	2	hepta-	7
tri-	3	octa-	8
tetra-	4	nona-	9
penta-	5	deca-	10

Cuadro 1.1: Prefijos Nomenclatura Sistemática

Consiste en nombrar el compuesto usando una serie de prefijos y sufijos para indicar la valencia del elemento central. Dichos Prefijos y Sufijos son:

Prefijos y Sufijos				
Hipooso				
-oso				
-ico				
Perico				

Cuadro 1.2: Prefijos y Sufijos de la Nomenclatura Tradicional

■ Nomenclatura de Adición La Nomenclatura de Adición consiste en nombrar los compuestos como adición de iones. Se utiliza sobre todo en Oxoácidos, Oxisales y Oxisales Ácidas

1.4 Número de Oxidación y Valencia

Se denomina valencia a la capacidad combinatoria que tiene un elemento cuando forma compuestos químicos. Normalmente las valencias se comparten entre familias de elementos, aunque hay excepciones. El número de oxidación es igual que la valencia pero con signo menos cuando el elemento actúa como anión y positivo cuando actúa como catión.

1.5 Sustancias Binarias

Se definen las sustancias binarias como aquellas formadas por dos tipos de elementos. Son sustancias binarias los óxidos, hidruros y sales binarias.

1.5.1 Formulación General de Sustancias Binarias

Las sustancias binarias se formulan siempre siguiendo las siguientes normas:

1. Se escriben los símbolos de los elementos que forman el compuesto:

PbO

2. Se intercambian las valencias de los elementos:

$$Pb_2O_4$$

3. Se simplifica si se puede:

$$Pb_{\cancel{2}}O_{\cancel{4}} \rightarrow PbO_2$$

1.5.2 Óxidos

Se denominan así a las combinaciones del oxígeno con otro elemento, metálico o no metálico, a excepción de los halógenos.

$$M_xO_y$$

En estos compuestos, el número de oxidación del oxígeno es -2, mientras que el otro elemento actúa con número de oxidación positivo. Se nombran siguiendo las Nomenclaturas Sistemáticas y de Stock.

Para hallar la valencia del elemento central se utiliza la siguiente fórmula:

$$Val(M) = \frac{2 \cdot y}{x} \tag{1.1}$$

Fórmula	Nomenclatura Sistemática	Nomenclatura de Stock
FeO	(Mon)óxido de Hierro	Óxido de Hierro (II)
Fe_2O_3	Trióxido de dihierro	Óxido de Hierro (III)
K_2O	Óxido de dipotasio	Óxido de Potasio ¹
P_2O_5	Pentaóxido de difósforo	Óxido de Fósforo (V)
Cu_2O	(Mon)óxido de dicobre	Óxido de Cobre (I)

Cuadro 1.3: Ejemplos de Óxidos

1.5.3 Peróxidos

Son combinaciones del anión peróxido O_2^{2-} , con un elemento metálico o no metálico. El grupo tiene valencia 2 y *el subíndice del oxígeno no se puede simplificar bajo ningún concepto*. El Compuesto mas simple es el H_2O_2 , Peróxido de Hidrógeno, que se conoce con el nombre común de Agua Oxigenada. Se nombran siguiendo las nomenclaturas sistemática y de Stock.

Fórmula	Nomenclatura Sistemática	Nomenclatura de Stock
Na_2O_2	Dióxido de disodio	Peróxido de Sodio
BaO_2	Dióxido de Bario	Peróxido de Bario
CuO_2	Dióxido de Cobre	Peróxido de Cobre

Cuadro 1.4: Ejemplos de Peróxidos

1.5.4 Hidruros Metálicos

Son combinaciones del Hidrógeno con un metal. La fórmula general es:

 MH_{r}

En los hidruros, *la valencia del elemento central siempre es el subíndice del hidrógeno*, ya que este siempre actúa con valencia 1. Se nombran utilizando las nomenclaturas Sistemática y de Stock.

Fórmula	Nomenclatura Sistemática	Nomenclatura de Stock
LiH	Hidruro de Litio	Hidruro de Litio
CaH_2	Dihidruro de calcio	Hidruro de Calcio
FeH_3	Trihidruro de hierroo	Hidruro de Hierro (III)
PdH_4	Tetrahidruro de paladio	Hidruro de Paladio (IV)

Cuadro 1.5: ejemplos de Hidruros Metálicos

1.5.5 Hidruros No Metálicos

Son combinaciones del Hidrógeno con no metales de los grupos 13, 14 y 15. Uno de los sistemas de nomenclatura recogidos en las recomendaciones de 2005 de la IUPAC, es la denominada sustitutiva, tal y como se ha comentado al principio. Esta forma de nombrar los compuestos está basada en los denominados *hidruros padres o progenitores*. Éstos son hidruros, con un número determinado de átomos de hidrógeno unidos al átomo central, de los elementos de los grupos 13 al 17 de la tabla periódica. El nombre de los hidruros padres o progenitores están recogidos en la tabla siguiente:

Nombre	Fórmula	Nombre	Fórmula	Nombre	Fórmula
BH_3	Borano	CH ₄	Metano	NH_3	Azano
AlH_3	Alumano	CH_4	Silano	NH_3	Fosfano
GaH_3	Galano	GeH_4	Germano	AsH_3	Arsano
InH_3	Indagano	SnH_4	Estannano	SbH_3	Estibano
TlH_3	Talano	PbH_4	Plumbano	BiH_3	Bismutano

Cuadro 1.6: Hidruros Parentales o Progenitores

1.5.6 Sales Binarias Metal-No Metal

Son combinaciones binarias entre un metal y un no metal con la siguiente fórmula general:

$$M_x B_y^2$$

El no metal actúa siempre con la *valencia correspondiente a su estado de oxidación negativo*. Se nombran añadiendo al no metal la terminación *-uro*. La valencia del elemento central se halla teniendo en cuenta la valencia con la que actúa el no metal, y viendo si esta está presente como subíndice en el metal. Se nombran mediante las nomenclaturas Sistemática y Stock.

Fórmula	Nomenclatura Sistemática	Nomenclatura de Stock
NaBr	Bromuro de sodio	Bromuro de Sodio
$FeCl_2$	Dicloruro de hierro	Cloruro de hierro (II)
PtI_4	tetrayoduro de platino	Yoduro de Platino (IV)
Ag_2S	Sulfuro de diplata	Sulfuro de Plata

Cuadro 1.7: Ejemplos de Sales Binarias Metal-No Metal

1.5.7 Sales Binarias No Metal-No metal

Son combinaciones binarias entre dos no metales con la siguiente fórmula general:

²También se consideran sales binarias las combinaciones del anión cianuro (CN^-) y del catión amonio (NH_4^+)

 $A_x B_y$

El más electronegativo se colocará siempre a la derecha y será el que actúe con la menor de las valencias posibles. Se nombrará con la terminación -uro. Aunque también se pueden nombrar con la Nomenclatura de Stock, se recomienda usar la Nomenclatura Sistemática.

Fórmula	Nomenclatura Sistemática	Nomenclatura de Stock
SF ₆	Hexafluoruro de azufre	Fluoruro de Azufre (VI)
PCl_3	Tricloruro de fósforo	Cloruro de Fósforo (III)
BN	Nitruto de boro	Nitruto de Boro
As_2S_5	Pentasulfuro de diarsénico	Sulfuro de Arsénico(V)
ICl_7	heptacloruro de yodo	Cloruro de Yodo (VII)

Cuadro 1.8: Ejemplos de Sales Binarias No Metal-No Metal

1.5.8 Hidrácidos

Son combinaciones del Hidrógeno con los elementos de los grupos 16 y 17. Los hidrácidos son en realidad sales de hidrógeno gaseosas disueltas en agua. Así, tendremos dos maneras de nombrarlas, como sal gaseosa o como hidrácido. Para nombrarlo como éste último, se añade la terminación -hídrico.

Fórmula	Nombre de Sal	Nombre de Hidrácido
HF	Fluoruro de Hidrógeno	Ácido Fluorhídrico
HCl	Cloruro de Hidrógeno	Ácido Clorhídrico
HBr	Bromuro de Hidrógeno	Ácido Bromhídrico
HI	Yoduro de Hidrógeno	Ácido Yodhídrico
H_2S	Sulfuro de Hidrógeno	Ácido Sulfhídrico
H_2Se	Seleniuro de Hidrógeno	Ácido Selenhídrico
H_2Te	Telururo de Hidrógeno	Ácido Telurhídrico

Cuadro 1.9: Hidrácidos nombrados como tales y como sales de hidrógeno

1.6 Sustancias Ternarias (I): Hidróxidos Metálicos y Oxoácidos

Se definen sustancias ternarias como aquellas que estas formadas por tres tipos distintos de átomos. Las sustancias ternarias constituyen uno de los grupos más importantes de toda la química inorgánica.

1.6.1 Hidróxidos Metálicos

Son combinaciones de un metal con el grupo OH, que en su conjunto tiene valencia 1. Su fórmula general es:

$$M(OH)_x$$

Se formula de la misma manera que los compuestos binarios, teniendo en cuenta que el grupo OH se considera como uno y que, por tanto, si hay que añadirle un subíndice éste va en paréntesis. Se nombran mediante las nomenclaturas Sistemática y de Stock: La valencia del elemento central siempre será el subíndice que acompaña al grupo OH (al igual que en los hidruros).

Fórmula	Nomenclatura Sistemática	Nomenclatura de Stock
NaOH	Hidróxido de sodio	Hidróxido de Sodio
$Ca(OH)_2$	Dihidróxido de calcio	Hidróxido de calcio
$Fe(OH)_3$	Trihidróxido de Hierro	Hidróxido de Hierro (III)
CuOH	Hidróxido de cobre	Hidróxido de Cobre (I)
$Mg(OH)_2$	Dihidróxido de magnesio	Hidróxido de Magnesio

Cuadro 1.10: Ejemplos de Hidróxidos Metálicos

1.6.2 Oxoácidos

Se denominan oxoácidos a aquellos ácidos que contienen oxígeno. Su fórmula general es:

$$H_aX_bO_c$$

Los oxoácidos provienen de añadir agua a un óxido de un no metal. Por tanto, para formularlos se seguirán los siguientes pasos:

 Se formula el óxido correspondiente. Para nuestro ejemplo formularemos el Óxido de Nitrógeno (V):

$$N_2O_5$$

2. Se le añade agua, procurando disponer los átomos según la fórmula general:

$$N_2O_5 + H_2O \rightarrow H_2N_2O_6$$

3. Se simplifica si se puede:

$$H_2N_2O_6 \rightarrow HNO_3$$

Según las recomendaciones de la IUPAC 2005, se pueden nombrar de tres maneras distintas: mediante la Nomenclatura Tradicional, Nomenclatura de Adición y Nomenclatura de Hidrógeno.

■ Nomenclatura Tradicional o Clásica Para nombrarlos de este modo, es necesario conocer todos los números de oxidación que puede presentar el elemento que actúa como átomo central en la formación de oxoácidos. Luego, el número de oxidación que presenta en el compuesto concreto que queremos nombrar, se indica mediante sufijo y/o prefijos. Con esta nomenclatura se pueden nombrar hasta cuatro oxoácidos diferentes para un elemento actuando como átomo central. Los prefijos y sufijos que se usan son:

Para hallar la valencia del elemento central del oxoácido, se utiliza la siguiente fórmula:

Pref.	Suf	Cuatro	Tres	Dos	uno
Hipo-	-oso	Más Bajo	Más Bajo		
	-oso	Tercero	Intermedio	Más Bajo	
	-ico	Segundo	Más Alto	Más Alto	Única
Per-	-ico	Más Alto			

Cuadro 1.11: Prefijos y Sufijos utilizados en la Nomenclatura Tradicional

$$Val(X) = \frac{2 \cdot c - a}{b} \tag{1.2}$$

Nomenclatura de Adición. La nueva nomenclatura de adición introducida por la IUPAC pretende dar información estructural del oxoácido a través de su nombre. Es decir, con la nomenclatura de adición nombramos la estructura de Lewis del oxoácido, lo cual nos dará información extra en el caso de compuestos complejos. Para ello, primero agrupamos los átomos de hidrógeno y oxígeno presentes en el ácido en forma de grupos OH y grupos O solitarios.

$$H_2SO_4 \equiv (OH)_2O_2S$$

Se nombran los grupos OH con un prefijo de cantidad y la palabra "hidroxido" los O con prefijo y la palabra "oxido" y por último el nombre del átomo central:

Dihiroxidooxidoazufre

Cuando un ácido presenta dos entidades dinucleares simétricas, pueden nombrarse estas entidades siguiendo la nomenclatura de adición. Para indicar que son dos entidades, se introduce el nombre entre paréntesis y se utiliza el prefijo bis-. Delante, separado por un guión, se nombra el elemento que sirve de puente. Este elemento se nombra anteponiéndole la letra griega μ - separada por un guión. Generalmente, en estos compuestos, el elemento que actúa como puente es el oxígeno y se nombra como -oxido-. Así, para el caso del Ácido Disulfúrico, $H_2S_2O_7$:

$$(OH)O_2S - O - SO_2(OH) \rightarrow \mu - oxido - bis(hidroxidodioxidoazufre)$$

■ Nomenclatura de Hidrógeno Consiste en nombrar, en primer lugar, los hidrógenos que contiene el ácido mediante la palabra *hidrogeno*-, precedida por el prefijo de cantidad. A continuación, sin dejar espacios y entre paréntesis, se nombra el anión según la nomenclatura de adición; es decir, en general, se nombran los oxígenos que tiene y se acaba con la raíz del nombre del átomo central acabado en -ato.

1.6.3 Oxoácidos de Interés Especial

■ **Prefijos -orto y -meta** Existen algunos ácidos que de forma natural suelen captar mas de una molécula de agua en el proceso de hidratación desde el óxido correspondiente. Cuando esto ocurre, se le antepone el prefijo *-orto*, si captan tres moléculas de agua, o *-meta* si solo captan una (aunque el prefijo meta se obvia salvo en los cosas en los que el ácido más común es el orto). Por ejemplo, el ácido ortosulfúrico:

$$SO_3 + 3 \cdot H_2O \longrightarrow H_6SO_6$$

Fórmula	Nombre	Fórmula	Nombre
H_5IO_6	Ácido Ortoperyódico	HIO ₃	Ácido Yódico
H_3PO_4	Ácido Forsfórico	HPO_3	Ácido Metafosfórico
H_3AsO_3	Ácido Arsenioso	HPAs ₃₂	Ácido Metaarsenioso
H_4SiO_4	Ácido Silícico	H_2SiO_3	Ácido Metasilícico
H_6TeO_6	Ácido Ortotelúrico	H_2TeO_4	Ácido Telúrico

Cuadro 1.12: Ejemplos de oxoácidos orto y meta

Como puede observarse en el Cuadro 1.12, en el caso de P, As y Si, estos elementos tienen tendencia natural a formar ácidos orto, por lo que se omite el prefijo orto y, por contra, se indica el prefijo meta para el caso de una molécula de agua de hidratación.

1.7 Iones 17

 Oxoácidos con Doble Número de Átomo Central Son compuestos que provienen de la hidratación de un óxido de un no metal dimerizado. Se nombran utilizando el prefijo dipiro (en desuso):

$$2 \cdot SO_3 + H_2O \rightarrow H_2S_2O_7$$

■ **Tioácidos y Peroxoácidos** Los tioácidos provienen de sustituir un oxígeno del oxoácido de partida por azufre. Ej:

$$H_2S_2O_3$$
 Ácido Tiosulfúrico H_3SPO_3 Ácido tiofosfórico

Los peroxoácidos son aquellos que tienen un oxígenos mas que el oxoácido de partida. Ej:

 HNO_4 Ácido Peroxonítrico H_2SO_5 Ácido Peroxosulfúrico

1.7 Iones

Los iones son especies con carga (ya sea un átomo o un grupo de átomos). En la fórmula de los iones monoatómicos, la carga se expresa con un superíndice a la derecha del símbolo del elemento. Su valor se indica con un número seguido del signo correspondiente Cu^{2+} En los iones poliatómicos, la carga, que se indica igualmente con un superíndice a la derecha del último elemento que forma el ion, corresponde a la suma de los números de oxidación que se atribuye a los elementos que lo constituyen. por ejemplo en el SO_4^{2-} , la garga (2-) pertenece a todo el ion. Cuando el valor de la carga es uno, ya sea positiva o negativa, sólo se indica con el signo en la fórmula.

1.7.1 Cationes Monoatómicos

Hay dos formas de nombrarlos, basadas en el número de carga o en el número de oxidación:

- 1. **Uso del número de carga (sistema Ewens–Basset)** Se nombra el elemento y se indica, seguidamente, el número de la carga entre paréntesis.
- 2. Uso del número de oxidación (sistema de Stock) Se nombra el elemento y se indica, seguidamente, el número de oxidación entre paréntesis.

Ion	Ewens-Basset	Stock
Fe^{3+}	Ion Hierro (3+)	Ion Hierro (III)
Au^+	Ion Oro (1+)	Ion Oro (I)
B^{3+}	Ion Boro (3+)	Ion Boro
Mg^{2+}	Ion Magnesio (2+)	Ion Magnesio

Cuadro 1.13: Ejemplos de Cationes Monoatómicos

1.7.2 Cationes Homopoliatómicos

Se utiliza la nomenclatura estequiométrica, añadiendole el número de carga correspondiente al nombre del elemento con el prefijo de cantidad y la terminación "-uro".

1.7.3 Oxogniones

Son los iones que resultan por la pérdida por parte de los oxoácidos de los iones Hidrógeno(1+) (H^+) . Se pueden nombrar utilizando tres nomenclaturas:

Nomenclatura Tradicional Se utilizan los prefijos y sufijos propios de la nomenclatura tradicional, pero con el siguiente cambio:

Fórmula	Nombre	Nombre Común Aceptado
O_2^{2-}	Dioxido(2-)	Peróxido
I_3^-	Triyoduro(1-)	
N_3^-	Trinitruro(1-)	Azida
S_2^{-}	Disulfuro(2-)	

Cuadro 1.14: Ejemplos de Cationes Homopoliatómicos

$$HClO_4$$
 Ácido Perclórico ClO_4^- Ion Perclorato H_2SO_2 Ácido Hiposulfuroso SO_2^{2-} Ion Hiposulfito

Como hay oxoácidos con varios hidrógenos, puede ocurrir que el anión derivado se forme por pérdida de algunos, pero no de todos los hidrógenos. En este caso, se antepone el prefijo hidrogeno-, dihidrogeno-, etc..., según el caso, al nombre del anión.

$$H_2SO_4$$
 Ácido Sulfúrico HSO_4^- Ion Hidrogenosulfato

Nomenclatura Sistemática Como hay oxoácidos con varios hidrógenos, puede ocurrir que el anión derivado se forme por pérdida de algunos, pero no de todos los hidrógenos. En este caso, se antepone el prefijo hidrogeno-, dihidrogeno-, etc..., según el caso, al nombre del anión. Se nombran los elementos, indicando el número de cada uno con los prefijos de cantidad. Sería como eliminar los hidrógenos de la Nomenclatura de Hidrógeno de los oxoácidos. Finalmente, se indica la carga del anión mediante el número de carga (sistema Ewens-Basset).

$$SO_4^{2-}$$
 Tetraoxidosulfato(2-) $Cr_2O_7^{2-}$ Heptaoxidodicromato(2-)

Para los aniones que contienen hidrógeno (oxoaniones ácidos) se puede usar esta nomenclatura, indicando la carga del anión al final del nombre entre paréntesis.

$$HSO_4^ Hidr\'ogeno(tetraoxidosulfato)(1-)$$
 $H_2PO_4^ Dihidr\'ogeno(tetraoxidofosfato)(1-)$

■ Nomenclatura de AdiciónPara nombrar estos aniones derivados, se siguen las mismas reglas que para los oxoácidos en cuanto a la forma de nombrar los grupos unidos átomo central, pero se añade el sufijo "-ato" al nombre del elemento que actúa como átomo central y, a continuación, el número de carga del anión entre paréntesis.

$$HSO_3^- \longrightarrow [(OH)O_2S]^-$$
 Hidroxidodioxidoazufre (2-)

En el caso de oxoaniones no ácidos, la nomenclatura de adición y la sistemática coinciden

1.8 Sustancias Ternarias (II): Oxisales

Las oxisales provienen de sustituir los hidrógenos de un oxoácido por un metal, intercambiando sus valencias y simplificando si se puede:

$$H_2SO_4 \xrightarrow{Mg} Mg_{\cancel{2}}(SO_4)_{\cancel{2}} \equiv MgSO_4$$

Se pueden nombrar utilizando tres tipos de nomenclatura:

 Nomenclatura Tradicional Se nombra el oxoanión y, tras la palabra "de", se indica el nombre del catión al que se le incorpora su valencia mediante el sistema de Stock en el caso que haya ambigüedad

Fórmula	Nombre
$FeClO_3)_2$	Clorato de Hierro (II)
$MgSO_4$	Sulfato de Magnesio
$Au_2(SO_2)_3$	Hiposulfito de Oro (III)
$NaNO_2$	Nitrito de Sodio
$KMnO_4$	Permanganato de Potasio
$K_2Cr_2O_7$	Dicromato de Potasio

Cuadro 1.15: Oxisales nombradas por la Nomenclatura Tradicional

■ Nomenclatura Sistemática Se nombra en primer lugar el anión de oxoácido (no se indica la carga) y, tras la palabra "de", se nombra el catión. La proporción de ambos constituyentes se indica mediante los prefijos multiplicativos.

Cuando el nombre de un constituyente comienza por un prefijo multiplicativo o para evitar ambigüedades, se usan los prefijos de cantidad alternativos (bis, tris, tetrakis, pentakis, etc...), colocando el nombre correspondiente entre paréntesis (esto es lo habitual con el oxoanión)

Fórmula	Nombre
$FeClO_3)_2$	Bis(trioxidoclorato) de Hierro
$MgSO_4$	Tetraoxidosulfato de Magnesio
$Au_2(SO_2)_3$	Bis(dioxidosulfato) de dioro
$NaNO_2$	dioxidonitrato de Sodio
$KMnO_4$	Tetraoxidomanganato de Potasio
$K_2Cr_2O_7$	Heptaoxidodicromato de dipotasio

Cuadro 1.16: Oxisales nombradas por la Nomenclatura Sistematica

■ Nomenclatura de Adición Se nombra el anión de acuerdo a la nomenclatura de adición y, tras la palabra "de", el catión, utilizando el número de carga correspondiente.

Fórmula	Nombre
$FeClO_3)_2$	Trioxidoclorato (1-) de Hierro (2+)
$MgSO_4$	Tetraoxidosulfato (2-) de Magnesio (2+)
$Au_2(SO_2)_3$	Dioxidosulfato (2-) de Oro (3+)
$NaNO_2$	Dioxidonitrato (1-) de Sodio (1+)
$KMnO_4$	Tetraoxidomanganato (1-)de Potasio (1+)
$K_2Cr_2O_7$	Heptaoxidodicromato (2-) de Potasio (1+)

Cuadro 1.17: Oxisales nombradas por la Nomenclatura de Adición

1.9 Sustancias Cuaternarias: Oxisales Ácidas

Como se ha comentado, algunos oxoácidos están compuestos por varios hidrógenos; si éstos pierden algunos de estos pero no todos, se forman aniones que contienen hidrógeno. Estos aniones

cuando se combinan con cationes dan especies neutras llamadas sales (oxisales) ácidas.

Nomenclatura Tradicional Se nombra el oxoanión ácido y, tras la palabra "de", se indica el nombre del catión al que se le incorpora su valencia mediante el sistema de Stock en el caso que haya ambigüedad.

Fórmula	Nombre
$Cu(HSO_4)_2$	Hidrogenosulfato de Cobre (II)
$CaHPO_4$	Hidrogenofosfato de Calcio
$Fe(H_2PO_3)_3$	Dihidrogenofosfito de Hierro (III)
$FeHBO_3$	Hidrogenoborato de Hierro (II)

Cuadro 1.18: Oxisales Ácidas nombradas por la Nomenclatura Tradicional

■ Nomenclatura de Hidrógeno Se nombra en primer lugar el anión de oxoácido (no se indica la carga) y, tras la palabra "de", se nombra el catión. La proporción de ambos constituyentes se indica mediante los prefijos multiplicativos. Cuando el nombre de un constituyente comienza por un prefijo multiplicativo o para evitar ambigüedades, se usan los prefijos de cantidad alternativos (bis, tris, tetrakis, pentakis, etc...), esto es lo habitual con el anión derivado del oxoácido. Además, como el nombre del anión lleva ya paréntesis, el nombre se coloca entre corchetes al utilizar los prefijos alternativos de cantidad.

Fórmula	Nombre		
$Cu(HSO_4)_2$	Bis[hidrógeno(tetraoxidosulfato)] de Cobre		
$CaHPO_4$	Hidrogeno(tetraoxidofosfato) de Calcio		
$Fe(H_2PO_3)_3$	Tris[dihidrogeno(trioxidofosfato)] de Hierro		
FeHBO ₃	Hidrogeno(trioxidoborato) de Hierro		

Cuadro 1.19: Oxisales Ácidas nombradas por la Nomenclatura de Hidrógeno

■ Nomenclatura de Adición Se nombra el anión de acuerdo a la nomenclatura de adición y, tras la palabra "de", el catión, utilizando el número de carga correspondiente.

Fórmula	Nombre
$Cu(HSO_4)_2$	Hidroxidotrioxidosulfato (1-) de Cobre (2+)
$CaHPO_4$	Hidrotrioxidofosfato (1-) de Calcio (2+)
$Fe(H_2PO_3)_3$	Dihidroxidooxidofosfato (1-) de Hierro (3+)
$FeHBO_3$	Hidroxidodioxidoborato (2-) de Hierro (2+)

Cuadro 1.20: Oxisales Ácidas nombradas por la Nomenclatura de Adición

1.10 Problemas 21

1.10 Problemas

Problema 1.1 Nombra por todas las nomenclaturas posibles los siguientes compuestos: CuO, Cu₂O, FeO, Fe₂O₃, CaO, CO₂, I₂O₅, SO₂, Cl₂O₇, SO₃, Na₂O₂, H₂O₂, Cu₂O₂, Li₂O₂, CuO₂

Problema 1.2 Formula los siguientes compuestos:

Óxido de mercurio (II), Óxido de litio, Monóxido de manganeso, Óxido de bario, Trióxido de dicloro, Óxido de bromo (III), Peróxido de potasio, Peróxido de bario, Peróxido de cesio

Problema 1.3 Nombra los siguientes compuestos por todas las nomenclaturas posibles: KH, NiH_2 , NaH, FeH_2 , BeH, H_2Se , HI, NH_3 , SiH_4 , HCl, H_2S , PdH_4 , $Cu(OH)_2$, $Pb(OH)_2$, NaOH, $Ni(OH)_3$, $Hg(OH)_2$, $CoCl_3$, Al_2Se_3 , CaF_2 , HBr, GaI_3

Problema 1.4 Formula los siguientes compuestos:

Hidruro de Rubidio, Hidruro de Escandio, Hidróxido de Hierro (II), Hidróxido de Cobalto (III), Ácido Sulfhídrico, Ácido Yodhídrico, Hidróxido de Potasio, Carburo de Paladio (II), Nitruro de Cobre (II), Sulfuro de Cadmio, Cloruro de Plata, Silicuro de Magnesio

Problema 1.5 Nombra por todas las nomenclaturas posibles los siguientes compuestos: NaH, SiH_4 , SbH_3 , PH_3 , H_2Se , $NiCl_3$, LiOH, $Cu(OH)_2$, HClO, CCl_4 , Li_2O , KCl, $CaSO_4$, $CaCO_3$, $Ba(OH)_2$, Na_2O , HCl, H_2SO_3 , HNO_3 , N_2O_5 , SO_3 , CaO, N_2O_3 , H_3PO_4 , Na_3PO_4 , $AgNO_3A$, $Mg(OH)_2$, SO_2 , CO_2O_2 , $NaNO_3$, GaH_3 , NaCNA, $(NH_4)HCO_3$

Problema 1.6 Formula los siguientes compuestos químicos:

Ácido crómico, Ácido Hiposelenioso, Ácido Brómico, Trihidrógeno(tetraoxidofosfato), Dihidrógeno(trioxidotelurato), Hidroxidooxidonitrógeno, Hidroxidooxidoiodo, bis(trioxidonitrato) de estroncio, dioxidosulfato de disodio, Tetraoxidofosfato(3-) de calcio (2+), trioxidonitrato(1-) de Oro(3+), sulfato de calcio, sulfato de cobre (II), ácido fosfórico, hipoclorito de sodio, nitrito de hierro (III), Ácido disulfúrico, Tiosulfato de Sodio, Bicarbonato de Sodio, Dihidrogenofosfato de Niquel (III), Tris[hidrogeno(tetraoxidofosfato)] de dialuminio

Problema 1.7 Nombra las siguientes especies por todas las nomenclaturas posibles: SO_2^{2-} , ClO_4^- , HCO_3^- , BO_3^- , PO_3^- , Hg_2^{2+} , CN^- , O_2^{2-} , Ca^{2+} , $HTeO_4^-$, MnO_4^- , NO_2^-

Problema 1.8 Formula las siguientes especies: Dioxocarbonato(2-), Ion Hipobromito,Ion Telurito, Dihidrógeno(trioxidofosfato) (2-), Ion Dicromato, Ion Perclorato, Tetraoxidomanganato (1-), Hidroxidodioxidoseleniato(1-), Ion Cobre (II),Ion dimercurio(2+), Hidrogento(dioxidocarbonato) (1-)

Herramientas Químicas

2 2.1 2.2 2.3 2.4 2.5 2.6 2.7 2.8 2.9 2.10 2.11	Química Cuantitativa Introducción Leyes Ponderales Teoría Atómica de Dalton Leyes Volumétricas Concepto de Mol Concepto de Equivalente Modelo del Gas Ideal Análisis Elemental y Composición Centesimal Disoluciones Estequiometría Problemas
3.1 3.2 3.3 3.4 3.5 3.6 3.7 3.8 3.9 3.10 3.11 3.12 3.13 3.14	Termodinámica Química 45 Introducción Termoquímica Sistema Termodinámico Variables de Estado Primer Principio de la Termodinámica Concepto de Entalpía Entalpía Estándar de Reacción: Diagramas Entálpi cos Cálculo de Entalpías de Reacción Segundo Principio de la Termodinámica Tercer Principio de la Termodinámica Espontaneidad de las Reacciones Químicas Problemas Citation Lists
4.1 4.2 4.3 4.4 4.5 4.6 4.7 4.8 4.9 4.10	In-text Elements Theorems Definitions Notations Remarks Corollaries Propositions Examples Exercises Problems Vocabulary



2.1 Introducción

Se define la Química (del egipcio *Keme*, "tierra") como la ciencia que estudia la estructura, propiedades, composición y transformación de la materia. La química moderna se desarrolló a partir de la alquimia, una práctica protocientífica de carácter filosófico, que combinaba elementos de la química, la metalurgia, la física, la medicina, la biología, entre otras ciencias y artes. Esta fase termina al ocurrir la llamada, Revolución de la Química, basada en la Ley de conservación de la Masa y la teoría de la combustión por oxígeno postuladas por el científico francés, Antoine L. Lavoisier.

La Química a veces es definida como La Ciencia Central a causa de su rol de conexión y articulación entre las ciencias físicas, de las cuales forma parte, junto con las ciencias de la vida, y algunas ciencias aplicadas como la medicina o la ingeniería.

2.2 Leyes Ponderales

Las leyes ponderales de la Química son un conjunto de leyes de carácter empírico desarrolladas entre 1789 y 1803 por los primeros químicos que trataban de encontrar relaciones entre las masas de los compuestos químicos que intervenían en una reacción química. Posteriormente fueron generalizadas y superadas con la aparición de la teoría atómica y el concepto de mol.

2.2.1 Ley de la Conservación de la Masa (Ley de Lavoisier)

Antonie-Laurent de Lavoisier (1743-1794), fue el primer químico que realizó cuidadosamente mediciones con la balanza, obteniendo una explicación correcta de las reacciones en las que metales como mercurio o cobre eran calentados en presencia de aire. En 1789, Lavoisier generalizó sus resultados a todas las reacciones químicas enunciando la llamada *Ley de conservación de la masa*:

Ley 2.2.1 — Ley de Lavoisier. En una reacción química, la masa total de las substancias que reaccionan (reactivos) es igual a la masa total de las substancias formadas (productos)

$$\sum_{i=1}^{N} (m_i)_{reactivos} = \sum_{i=1}^{N} (m_i)_{productos}$$
(2.1)

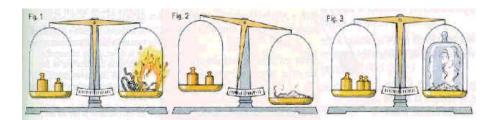


Figura 2.1: Representación gráfica de las experiencias de Lavoisier

2.2.2 Ley de las Proporciones Definidas (Ley de Proust)

Si en condiciones cuidadosamente controladas, hacemos reaccionar por ejemplo, 10 g de cloro con 10 g de sodio, podrá probarse que los 10 g de cloro no reaccionan con todo el sodio, sino solo con una porción de él (6,484 g exactamente) quedándose el exceso sin reaccionar. Según la experiencia, el cloro y el sodio han reaccionado en la proporción en peso:

$$\frac{m_{Na}}{m_{Cl}} = \frac{6,484}{10}$$

Ley 2.2.2 — Ley de Proust. Cuando dos o más elementos se combinan para formar un determinado compuesto lo hacen en una relación en peso constante independientemente del proceso seguido para formarlo.

Esta ley fue enunciada por *Louis Proust* en 1799, y atacada por *C. L. Berthollet*, quién creía que la composición de un compuesto variaba según el método por el que se había preparado.

Modernamente se conocen compuestos sólidos que no cumplen la ley de las proporciones definidas (óxidos y sulfuras de elementos de transición), y se les llama compuestos no estequiométricos o *Compuestos Berthóllidos*.

Podemos decir por tanto que:

$$\frac{m_{Na}}{m_{Cl}} = \frac{6,484}{10} = \frac{12,968}{20} = \frac{4,934}{7,61} = cte$$

Cada muestra de sal común descompuesta nos arrojará invariablemente un 39,34 % de sodio y un 60,66 % de cloro (relación 6,484/10)

2.2.3 Ley de las Proporciones Múltiples (Ley de Dalton)

La ley anterior no excluye la posibilidad de que dos sustancias puedan formar compuestos diferentes si varían las condiciones experimentales. De hecho, esto es lo que sucede, por ejemplo, con el oxígeno y el hierro o el cobre o el carbono, que dependiendo de las condiciones de la experiencia se originan óxidos diferentes. Para cada proceso individual, se cumple, por supuesto la ley

de Proust, sin embargo, cabe hablar de otra más general que incluye estos casos. Veamos un ejemplo:

Al hacer reaccionar un gramo de oxígeno con cobre, la cantidad de éste consumida es exactamente 3,971 g:

$$Oxgeno(1gr) + Cobre(3,971gr) \rightarrow xidodeCobre$$

Pero en condiciones experimentales diferentes, un gramo de oxígeno puede reaccionar con 7,942 g de cobre para dar lugar a otro compuesto diferente:

$$Oxgeno(1gr) + Cobre(7,942gr) \rightarrow xidodeCobre'$$

Si dividimos los gramos de cobre que en ambos casos se combinaron con la misma cantidad (un gramo) de oxígeno, veremos que resulta una relación muy sencilla:

$$\frac{3,971}{7,942} = \frac{1}{2}$$

Lo anterior es un ejemplo de la Ley de las Proporciones Múltiples enunciada en 1803 por *J. Dalton*:

Ley 2.2.3 — Ley de Dalton de las Proporciones Múltiple. Las cantidades de un mismo elemento que se combinan con una cantidad fija de otro para formar varios compuestos están en la relación de los números enteros sencillos

2.2.4 Ley de las Proporciones Equivalentes (Ley de Richter)

Fue enunciada por primera vez por *J.B. Richter* en 1792. Es de importancia para la historia de la química y el desarrollo del concepto de mol y de fórmula química más que para la química actual. Esta ley permite establecer el peso equivalente o peso-equivalente-gramo, que es la cantidad de un elemento o compuesto que reaccionará con una cantidad fija de una sustancia de referencia.

Ley 2.2.4 — Ley de Richter. Las masas de dos elementos diferentes que se combinan con una misma cantidad de un tercer elemento, guardan la misma relación que las masas de aquellos elementos cuando se combinan entre sí.

2.3 Teoría Atómica de Dalton

El Químico inglés *John Dalton* (1766-1844) fue uno de los primeros que reflexionó sobre estas leyes empíricas y otras leyes sobre el comportamiento de los gases, llegando a la conclusión de que los elementos químicos deberían estar constituidos por partículas pequeñísimas e indivisibles a las que denominó átomos. Mucho tiempo antes que él, el griego *Demócrito de Abdera* había propuesto esta misma denominación para explicar los constituyentes íntimos de la materia. Dalton adoptó el mismo término. La llamada **Teoría Atómica de Dalton** establecía como puntos fundamentales que:

- Los elementos químicos están formados por partículas (átomos) que son indivisibles e inalterables en todo proceso químico.
- Todos los átomos de un mismo elemento son exactamente ¡guales entre sí y distintos a los átomos de otro elemento diferente.

 Los compuestos se originan por la unión intensa de átomos distintos en una proporción constante.

Con estas ideas, Dalton podía explicar las leyes ponderales conocidas. En efecto, si los átomos son inalterables y una reacción química no es más que la reordenación de átomos, deberá haber el mismo número de estos átomos en todo el proceso, por lo que la masa debería permanecer inalterada.

2.4 Leyes Volumétricas

Son un conjunto de leyes de naturaleza empírica que relaciona los volúmenes de gases que intervienen en una reacción química.

2.4.1 Ley de los Volúmenes de Combinación de Gay-Lussac

El químico francés *Joseph Louis Gay-Lussac* (1778-1850) estudió las reacciones en las que intervenían gases, realizando sus estudios en reacciones a Presión y Temperatura constantes. Tras estudiar distintos tipos de reacciones químicas (siempre en fase gaseosa) llegó a la conclusión que ocurría algo análogo a la la Ley de Proust cuando se medían los distintos volúmenes de las sustancias intervinientes en la reacción.

Ley 2.4.1 — Ley de los Volúmenes de Combinación de Gay-Lussac. Los volúmenes de las sustancias gaseosas que intervienen en una reacción química, medidos en las mismas condiciones de presión y temperatura, están en relación de números enteros sencillos.

Cuando Dalton recibió esta información encontró algo que no cuadraba con su teoría de átomos indivisibles.

Si la reacción de formación de agua se da en esas proporciones es evidente que la fórmula del agua no es HO, sino H_2O . Esto fue aceptado por Dalton (es una manera de determinar fórmulas) y supuso la corrección de la escala de masas atómicas relativas: el átomo de oxígeno tiene una masa igual a la de 16 átomos de hidrógeno.

Dalton aceptó que dos átomos de hidrógeno se combinaban con un átomo de oxígeno. Pero esta combinación debía producir una partícula (él la llamó átomo- compuesto) de agua, y por tanto, el volumen de agua obtenido debía ser un litro. Como Gay-Lussac informó de la obtención de dos litros de vapor de agua, Dalton supuso que tales medidas no podían ser correctas. Sin embargo, los datos obtenidos en el laboratorio eran claros: Gay-Lussac no estaba equivocado, un litro de oxígeno se combina con dos litros de hidrógeno y produce dos litros de vapor de agua. La solución vendría de otro químico genial: **Amadeo Avogadro**.

2.4.2 Hipótesis de Avogadro

En sus hipótesis Avogadro sugiere que las partículas de los gases son en realidad de dimensiones mucho menores que el volumen del recipiente que las contienen, de forma que estas no están en reposo como creía Dalton, sino están muy separadas en continuo movimiento. Sin esta condición no parecería lógico que moléculas grandes o pequeñas ocuparan el mismo volumen. Pronto se comprobó que las partículas de los gases elementales son moléculas diatómicas y la primera utilidad fue la determinación de fórmulas de compuestos y, por tanto, la determinación de las masas atómicas relativas correctas.

Según Avogadro:

- Cada molécula de agua debe tener, como mínimo, un átomo de oxígeno. Si el volumen de agua que se obtiene es el doble que el de oxígeno, la molécula de oxígeno debe ser diatómica, para que cada molécula origine los átomos que permitan formar dos moléculas de agua.
- Como el volumen de agua es el mismo que el de hidrógeno, debe haber el mismo número de moléculas de cada uno.

Ley 2.4.2 — Hipótesis de Avogadro. En condiciones iguales de presión y temperatura, volúmenes iguales de gases diferentes tienen el mismo número de moléculas....

2.5 Concepto de Mol

Determinar la masa de un átomo o de una molécula es evidentemente imposible usando las balanzas, de ahí que los químicos hayan decidido definir una "nuevaünidad para medir la masa de átomos y moléculas. A esa unidad se la denomina unidad de masa atómica (uma) y ya que el hidrógeno se ha comprobado que es el elemento de menos masa es lógico definirlo como unidad, definirlo como uma.

Así en una primera aproximación diremos que la unidad de masa atómica es simplemente la masa de un átomo de hidrógeno. De modo que si decimos que, por ejemplo, el carbono tiene de masa atómica 12 urna, con ello estamos diciendo que un átomo de carbono pesa 12 veces más que un átomo de hidrógeno, o si decimos que la molécula de agua pesa 18 urna, decimos que una molécula de agua pesa 18 veces más que un átomo de hidrógeno, y así sucesivamente.

Lógicamente la masa de una molécula (masa molecular) se obtendrá por la suma de las masas atómicas de cada uno de los elementos que la forman. Esos datos de masas atómicas vienen recogidas en la tabla periódica. Con todo, en los laboratorios las balanzas no miden uma, sino gramos, de ahí que haga falta hallar una relación entre ambas escalas.

Mil moléculas (o átomos) de cualquier especie es aún un número muy pequeño para poder pesarse en la balanza, pero todo es cuestión de escoger un número muy grande de moléculas (o átomos) que podamos pesar. Lógicamente, 1000 átomos de carbono, por ejemplo, pesarían en uma $12 \cdot 1000$. Si en lugar de elegir mil elegimos 10^{23} resulta que ese es un número ya muy muy grande. Si escogemos $6,02 \cdot 10^{23}$ átomos de carbono, éstos pesarán $12 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}$ uma, pero curiosamente, al poner todos esos átomos sobre la balanza, çuriosamente" pesan 12 gramos.

Definición 2.5.1 — Mol. El mol corresponde con la cantidad de materia que contiene $6,022 \cdot 10^{23}$ átomos o moléculas de una determinada sustancia

Esa es la ventaja de elegir "ese número tan raro", que **la masa en gramos de la especie elegida coincide numéricamente con la masa en uma**. A ese "número tan raro" se le conoce con el nombre de **Número de Avogadro**:

$$N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$$

Por todo lo anteriormente expuesto aquí, existe una manera de calcular la equivalencia entre gramos y moles de una substancia:

Definición 2.5.2 — Definición de Mol. Se define el Mol como los gramos de una determinada sustancia dividida por su masa molecular:

$$n = \frac{gr}{M_m} \tag{2.2}$$

Ejercicio 2.1 Calcula los moles de moléculas de Ácido Sulfúrico contenidas en 100 gr de dicha substancia. Calcula también los moles y el número de átomos de oxígeno.

La masa molecular del ácido sulfúrico (H_2SO_4) es: $M_m = 2 \cdot 1 + 1 \cdot 32 + 4 \cdot 16 = 98gr/mol$

El número de moles de Ácido Sulfúrico por tanto, es: $n = \frac{100}{98} = 1,021$ moles de H_2SO_4

Y el número de moléculas: $1,021 \cdot 6,02 \cdot 10^{23} = 6,14 \cdot 10^{23}$ moléculas de H_2SO_4

Puesto que existen 4 átomos de oxígeno por molécula de ácido sulfúrico:

1,021 moles de $H_2SO_4 \cdot 4 = 4,84$ moles de átomos de oxígeno $4 \cdot 6,14 \cdot 10^{23}$ moléculas de $H_2SO_4 = 2,46 \cdot 10^{24}$ átomos de oxígeno

2.6 Concepto de Equivalente

Se define Equivalente o Equivalente Gramo a la masa de una substancia dada que:

- Sustituye o reacciona con un mol de iones hidrógeno (H^+) en una reacción ácido-base.
- Sustituye o reacciona con un mol de electrones en una reacción redox.

El concepto de equivalente es de gran utilidad sobre todo en reacciones ácido-base y redox, puesto que en dichas reacciones las sustancias intervinientes lo hacen equivalente a equivalente, lo cual simplifica muchísimo los cálculos. Se puede calcular:

Definición 2.6.1 — Equivalente. Se define Equivalente como los gramos de cierta sustancia divididos entre su Masa Equivalente

$$eq = \frac{gr}{M_{eq}} \tag{2.3}$$

Como podemos observar la similitud con la definición de Mol es evidente, como evidente es también la semejanza entre Masa Equivalente y masa Masa Molecular:

Definición 2.6.2 — Masa Equivalente. Se define Masa Equivalente de una sustancia en una reacción química dada como la Masa Molecular de dicha sustancia entre su valencia en dicha reacción química, entendiendo por valencia el número de Hidrógenos intercambiados en una reacción ácido-base o el número de electrones cedidos o absorbidos en una reacción Redox

$$M_{eq} = \frac{M_m}{Val} \tag{2.4}$$

2.7 Modelo del Gas Ideal

Un gas ideal es un modelo teórico que explica el comportamiento de los gases, simplificando su comportamiento y permitiendo su estudio teórico de manera sencilla. Dicho modelo se basa en las siguientes premisas:

- El número de partículas constituyentes del gas es muy grande, como también lo son las distancias entre ellas en comparación con el recipiente que las contiene. Por tanto, podemos considerar las partículas como masas puntuales con un volumen despreciable
- 2. Las partículas que forman el gas se encuentran en continuo movimiento, caótico y muy rápido.
- Las partículas chocan entre si elásticamente. También se producen choques elásticos con las paredes del recipiente, siendo la Presión del gas el resultado macroscópico de dicho movimiento.
- 4. Se consideran despreciables las fuerzas entre partículas, salvo en el momento de los choques. Esto implica que los gases ideales no licúan.
- 5. El gas es considerado puro, es decir, todas las moléculas son iguales.

Solo los gases mas ligeros en condiciones de bajas presiones y temperaturas tienen un comportamiento que se aproxima al del gas ideal. Sin embargo, las conclusiones extraídas de dicho modelo resultan altamente valiosas a la hora de estudiar (y entender) el comportamiento de los gases reales.

2.7.1 Ecuación de Estado de los Gases Ideales

Se definen las *Variables de Estado* de un sistema como aquellas que por si mismas son capaces de definir totalmente el estado de un sistema fisicoquímico. En el caso de los gases, estas variables de estado son tres, a saber, **Presión, Volumen y Temperatura**.

Para el caso de los Gases Ideales, existe una ecuación que relaciona de manera extremadamente sencilla y eficaz las tres variables de estado. A esta relación se le conoce como **Ecuación de Estado de los Gases Ideales**:

Definición 2.7.1 — Ecuación de Estado de los gases Ideales. El producto de la Presión a la que está sometido un Gas Ideal por su Volumen es directamente proporcional a la temperatura de éste:

$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T \tag{2.5}$$

Donde P se mide en atmósferas, V en litros, n en moles y T en Kelvin. A R se le conoce como constante de los gases ideales, y su valor es $R = 0.082 atm \cdot l/mol \cdot K$. La Ley de los gases ideales es totalmente coherente con las leyes de Gay-Lussac y Boyle-Mariotte estudiadas en cursos anteriores.

Una de las características mas destacables de la Ecuación de los Gases Ideales es que es totalmente independiente de de la naturaleza del gas que estemos estudiando, lo cual hace de ella una herramienta prácticamente universal.

Ejercicio 2.2 Calcula el Volumen que ocupará un mol de Gas Ideal medido en Condiciones Normales.

En Química se definen las Condiciones Normales (C.N) a aquellas correspondientes a P=1 atm y T=273 K. Por tanto:

$$V = \frac{n \cdot R \cdot T}{V} = \frac{1 \cdot 0,082 \cdot 273}{1} = 22,4l$$

Según lo dicho anteriormente, la ecuación de los gases ideales no depende de la naturaleza del gas. Por tanto se puede concluir que:

Definición 2.7.2 — Volumen de un Gas Ideal en CN. Un mol de cualquier gas ideal medido en Condiciones Normales ocupa un Volumen de 22,4 1

2.7.2 Mezcla de Gases: Ley de Dalton de las Presiones Parciales

Puesto que es casi imposible encontrar reactivos que sean químicamente puros, por norma general los gases se encuentran formando mezclas, por lo que su estudio se hace mas difícil. Fue el científico ingles J. Dalton quien en 1801 resolvió el problema enunciando la **Ley de las Presiones Parciales**

Definición 2.7.3 — Presión Parcial de un gas. Se define la Presión Parcial de un gas en una mezcla como aquella que tendría dicho gas si en el recipiente que contiene la mezcla estuviese el solo a las mismas condiciones de Temperatura

Por tanto podemos enunciar:

Ley 2.7.1 — Ley de Dalton de las Presiones Parciales. La presión de una mezcla de gases ideales que no reaccionan químicamente, es igual a la suma de las presiones parciales que ejercería cada uno de ellos si sólo uno ocupase todo el volumen de la mezcla:

$$P_T = \sum_{i=1}^N P_i$$

$$P_i = X_i \cdot P_T$$

Donde P_T es la presión total, P_i la presión parcial de gas en la mezcla y X_i la fracción molar del gas en dicha mezcla.

Si estamos ante el caso de un gas ideal, la ecuación de estado también se puede aplicar a cada gas por separado:

$$P_i = n_i \cdot R \cdot T$$

2.8 Análisis Elemental y Composición Centesimal

Uno de los primeros problemas al que se enfrenta un químico cuando se encuentra ante un compuesto químico desconocido es hallar cual es su composición. Esto es de vital de importancia si nos encontramos ante un compuesto orgánico, en donde el primer paso será siempre el encontrar su formula molecular, como actuación previa para poder determinar su estructura. Así definimos

composición centesimal como el porcentaje en masa de cada uno de los elementos que forman un compuesto en relación a la masa total.

Ejercicio 2.3 Indica la Fórmula Molecular de un compuesto químico que contiene 40 % de C, 6,7 % de H y 53,3 % de O. Su masa molecular obtenida por espectrometría de masas es 60 gr/mol.

Dividimos cada uno de los porcentajes entre su masa atómica:

$$C: \frac{40}{12} = 3,33 H: \frac{6,7}{1} = 6,7 O: \frac{53,3}{16} = 3,33$$

A continuación dividimos entre el número más bajo para establecer la proporción:

$$C: \frac{3,33}{3,33} = 1 \ H: \frac{6,7}{3,33} \simeq 2 \ O: \frac{53,3}{16} = 1$$

Por tanto la fórmula empírica del compuesto es $(CH_2O)_x$, cuya masa molecular es $M_{FE} = 12 + 2 \cdot 1 + 16 = 30$ gr/mol.

Para calcular la formula molecular, dividimos la masa molecular del compuesto entre la masa molecular de la fórmula empírica: $x = \frac{60}{30} = 2$

Por lo que la fórmula molecular del compuesto será $(CH_2O)_2 = C_2H_4O_2$

2.8.1 Análisis Elemental por Combustión

El método clásico para realizar un análisis elemental se basa en el hecho de que cualquier hidrocarburo sometido a una combustión genera como productos CO_2 y H_2O :

$$C_xH_yO_z + O_2 \rightarrow mCO_2 + nH_2O$$

El aparato analizador consiste en en una cámara cerrada en donde se produce una combustión total del analito. El tren de gases producido se hace pasar por un montaje que incluye un primer recipiente en donde nos encontramos con un agente anhidro ($Mg(ClO_4)_2$ o $CaCl_2$) que atrapa todo el agua generada. Posteriormente se dispone un segundo recipiente que contiene una base fuerte (normalmente KOH) para atrapar todo el CO2 formado. La diferencia de peso de los recipientes antes de la combustión y después nos dará la cantidad de CO_2 y H_2O formadas. Es, por tanto, un método de análisis gravimétrico.

Ejercicio 2.4 Por combustión de 0,25 gr de una substancia orgánica compuesta por C, H y O, se obtienen 0,568 gr de CO_2 y 0,232 gr de H_2O . Calcula la fórmula empírica del compuesto.

El objetivo va a ser calcular el número de moles de átomos de C, H y O presentes en la muestra. En el caso de los dos primeros es directo:

C:
$$\frac{0.568}{44} = 0.0129 moles CO_2 \cdot 1 = 0.0129$$
 moles de C
H: $\frac{0.232}{18} = 0.0128 moles de H_2 O \cdot 2 = 0.0257$ moles de H

En el caso del Oxígeno es un poco más complicado, pues la cantidad presente en CO_2 y H_2O proviene tanto del compuesto problema como del O_2 del aire. Por tanto, sacamos los gr de

```
C e H atómicos:
```

C: $0.0129 \cdot 12 = 0.1549$ gr de C H: $0.0257 \cdot 1 = 0.0257$ gr de H

Y aplicando la Ley de Lavoisier:

 $m_O = 0.25 - (0.1549 + 0.0257) = 0.0694$ gr de O / 16 = 0.0044 moles de O

Ahora dividimos entre el menor número de moles atómicos:

C: $\frac{0.0118}{0.0043} = 3$ H: $\frac{0.0257}{0.0043} = 6$

Luego la fórmula empírica del compuesto es C_3H_6O

Disoluciones 2.9

Una disolución se define como una mezcla homogénea en la cual uno de los componentes (disolvente) se encuentra en mucha mayor proporción que el otro (soluto). Tanto disolvente como soluto pueden estar en cualquiera de los tres estados de agregación de la materia, dando lugar a infinidad de tipos distintos de disoluciones:

Estado físico de las sustancias sin mezclar		Estado fisico del material	Ejemplos			
Soluto		Disolvente	Disolución	300	X5055	
gaseoso	en	gaseoso	gaseoso*	aire	Oxígeno disuelto en nitrógeno	
liquido		gaseoso		aire húmedo	Agua disuelta en nitrógeno	
gaseoso	en	líquido		bebidas gaseosas	Dióxido de carbono disuelto en agua	
líquido		en	líquido	liquido	anticongelante	Etilenglicol disuelto en agua
sólido		líquido		agua endulzada	Azúcar disuelta en agua	
gaseoso	en	sólido		maiz palomero	Vapor de agua disuelto en almidón	
líquido		sólido	sólido	amalgama dental	Mercurio disuelto en plata	
sólido		sólido		soldadura	Estaño disuelto en plomo	

Fuente: Conceptos base de la Química, Sosa P., p.21

Figura 2.2: Resumen de los distintos tipos de disoluciones

El estudio de las disoluciones en química se hace de vital importancia debido a que la inmensa mayoría de reacciones químicas tienen lugar mediante disoluciones acuosas.

2.9 Disoluciones 35

2.9.1 Formas de Expresar la Concentración

Existen varias formas matemáticas de expresar la concentración en una disolución:

Definición 2.9.1 — Porcentaje en Masa. Se define como la masa de soluto entre la masa total de disolución:

$$\%(m/m) = \frac{m_{sol}}{m_{sol} + m_{dyte}} x100 \tag{2.6}$$

Definición 2.9.2 — Porcentaje en Volumen. Se define como el volumen de soluto entre el volumen total de disolución:

$$\%(v/v) = \frac{v_{sol}}{v_{sol} + v_{dyte}} x100 \tag{2.7}$$

Se suele utilizar en el caso de disoluciones con solutos líquidos.

Definición 2.9.3 — Gramos por Litro. Se define como los gramos de soluto entre el volumen total en litros de la disolución:

$$gr/l = \frac{gr_{sol}}{V(l)_{dison}} \tag{2.8}$$

Definición 2.9.4 — Molaridad. Se define como los moles de soluto entre el volumen total en litros de la disolución:

$$M = \frac{n_{sol}}{V(l)_{dison}} \tag{2.9}$$

Es, con diferencia, la más utilizada de todas.

Definición 2.9.5 — Molalidad. Se define como los moles de soluto entre los kilogramos de disolvente:

$$m = \frac{n_{sol}}{m(Kgr)_{dvte}} \tag{2.10}$$

Definición 2.9.6 — Normalidad. Se define como los equivalentes de soluto entre el volumen total en litros de la disolución:

$$N = \frac{eq_{sol}}{V(l)_{dison}} \tag{2.11}$$

Debido a su relación con la Molaridad, ambas magnitudes se pueden expresar: $N = M \cdot val$

Definición 2.9.7 — Fracción Molar de Soluto. Se define como la proporción molar de soluto en la disolución expresada en tanto por uno:

$$X_s = \frac{n_{sol}}{n_{sol} + n_{dvte}} \tag{2.12}$$

Definición 2.9.8 — Fracción Molar de Disolvente. Se define como la proporción molar de disolvente en la disolución expresada en tanto por uno:

$$X_d = \frac{n_{dvte}}{n_{sol} + n_{dvte}} \tag{2.13}$$

En ambas fracciones molares se cumple que: $X_s + X_d = 1$

En los cálculos con disoluciones se suele utilizar de manera habitual la densidad. Por tanto, es útil recordar que la densidad relaciona la masa de la disolución con el volumen de dicha disolución:

$$d = \frac{m_{dison}}{V_{dison}}$$

Ejercicio 2.5 Un ácido sulfúrico comercial tiene una etiqueta que indica 95 % (m/m) y d = 1,83 gr/cm^3 . Calcula su molaridad, molalidad, normalidad, gramos litro y fracciones molares de soluto y disolvente.

Del dato de porcentaje podemos deducir que en 100 gr de disolución hay 95 gr de soluto puro y por tanto 5 gr de disolvente puro. Por tanto podemos utilizar estos datos para obtener el volumen de la disolución:

$$V_{dison} = \frac{M_{dison}}{d} = \frac{100}{1,83} = 54,64 \text{ ml}$$

Por otro lado, y sabiendo que la Masa molecular del ácido sulfúrico es 98 gr/mol, podemos calcular algunas magnitudes:

$$M = \frac{\frac{95}{98}}{0.05464} = 17,74 \text{ M}$$

$$gr/l = \frac{95}{0.05464} = 1738.6 \text{ gr/l}$$

$$m = \frac{\frac{95}{98}}{0,005} = 19,38 \text{ mol/Kg}$$

Puesto que el H_2SO_4 contiene dos hidrógenos, su valencia es dos y, por tanto, su Normalidad:

$$N = M \cdot val = 17,74 \cdot 2 = 35,48 \text{ N}$$

Y sus fracciones molares de soluto y disolvente:

$$X_s = \frac{\frac{95}{98}}{\frac{95}{98} + \frac{5}{18}} = 0.78$$

$$X_d = 1 - X_s = 0.22$$

2.9.2 Diluciones

Se puede definir una dilución en una disolución acuosa como el proceso de añadir agua pura a una alícuota de una disolución concentrada para que su concentración sea menor. En un laboratorio químico es una tarea bastante común puesto que muchos compuestos que se utilizan de manera muy habitual (cómo algunos ácidos inorgánicos) suelen venir en forma de disolución muy concentrada. El cálculo de diluciones se basa en el hecho de que el número de moles de soluto presentes en la alícuota de la disolución concentrada es el mismo que en la disolución diluida, pues la variación de la concentración de la disolución se debe al aumento del volumen de la misma.

Y sustituyendo en la definición de Molaridad:

$$V_{conc} \cdot M_{conc} = V_{dil} \cdot M_{dil}$$

Ejercicio 2.6 Queremos preparar 250 ml de una disolución 0,5 M de Ácido Sulfúrico a partir de una disolución comercial de 95 % (m/m) y d = 1,83 gr/cm^3 . Calcula el volumen necesario que debemos tomar de la disolución comercial para obtener la dilución.

Lo primero que debemos de hacer es expresar la concentración del ácido comercial en molaridad (pues lo más común es que las etiquetas nos indiquen densidad y porcentaje en masa). Omitiremos los cálculos, puesto que son los mismos que en el ejercicio anterior. Por tanto, una disolución 95 %(m/m) y de densidad 1,83 gr/cm^3 es equivalente a una disolución 17,74 M. Por ello, y teniendo en cuenta que el número de moles de soluto no varía en la disolución comercial:

$$V_{conc} \cdot M_{conc} = V_{dil} \cdot M_{dil}$$

Como nos piden el volumen de la concentrada:

$$V_{conc} = \frac{V_{dil} \cdot M_{dil}}{M_{conc}} = \frac{250 \cdot 0.5}{17.74} = 7 \text{ ml}$$

Luego si cogemos una alícuota de 7 ml de la disolución comercial y completamos en un matraz aforado hasta los 250 ml, obtendremos una disolución 0,5 M.

2.10 Estequiometría

Se puede definir Estequiometría como el cálculo de las relaciones cuantitativas entre los reactivos y los productos de una reacción química. Estas relaciones se pueden deducir en base a la teoría atómica, aunque históricamente se desarrollaron siguiendo principios y leyes empíricas. Constituye en si misma uno de los pilares básicos del trabajo en el laboratorio, por lo que se hace imprescindible su estudio en esta asignatura.

2.10.1 Ajuste de Reacciones Químicas

Una reacción química se puede definir como un cambio en la ordenación de los átomos entre los reactivos y los productos para dar compuestos químicos totalmente distinto. Puesto que ningún proceso químico puede violar la Ley de Lavoisier de Conservación de la Masa, se hace necesario antes de entrar en cualquier consideración de carácter cuantitativo asegurarse que el numero total de átomos presentes tanto en reactivos como en productos sean iguales (ya que la materia se conserva y ningún átomo puede aparecer o desaparecer de la nada) A este proceso se le conoce como **Ajuste de una Reacción Química**.

Por ejemplo, para la reacción de formación del agua:

$$H_2 + O_2 \longrightarrow H_2O$$

Si observamos bien nos daremos cuenta que en el balance global de átomos, a la derecha solo hay un átomo de oxígeno y a la derecha dos. La forma de solventar esto sería multiplicar por dos el

agua. Pero si multiplicamos el agua se nos modifica tanto el número de oxígenos como el número de hidrógenos, por lo que habría que multiplicar por dos también el hidrógeno molecular, quedándose totalmente ajustada la reacción.

$$2H_2 + O_2 \longrightarrow 2H_2O$$

Por lo tanto para que se cumpla la Ley de Conservación de la Masa tiene que ocurrir que:

2 moléculas de Hidrógeno reaccionan con una molécula de Oxígeno para dar 2 moléculas de agua

La escala atómica es demasiado pequeña para manipularse en un laboratorio. Pero como la reacción es proporcional también se puede cumplir tomando como referencia el mol. Así pues:

2 moles de Hidrógeno reaccionan con un mol de Oxígeno para dar 2 moles de agua

2.10.2 Estequimetría con un Reactivo en Exceso

Sería el caso mas simple de todos, aquel en el que la cantidad de un reactivo es lo suficientemente mayor como para que no haya que tenerlo en cuenta a la hora de hacer los cálculos.

Ejercicio 2.7 Se hacen reaccionar 15 gr de Hidrógeno con exceso de oxígeno. Calcula la cantidad de agua formada.

Escribimos y ajustamos la reacción química:

$$2H_2 + O_2 \longrightarrow 2H_2O$$

Calculamos después los moles de hidrógeno que se hacen reaccionar:

n = 15 / 2 = 7,5 moles de Hidrógeno

Y ahora planteamos un regla de tres con la proporción que nos indica la reacción:

$$\frac{2 \text{ moles de } H_2}{7.5 \text{ moles de } H_2} = \frac{2 \text{ moles de } H_2O}{x \text{ moles de } H_2O}$$
; x = 7,5 moles de H_2O

Por último expresamos el resultado en gramos: $gr = 7.5 \cdot 18 = 135$ gr de H_2O

2.10.3 Reactivo Limitante y Reactivo en Exceso

Lo normal cuando hacemos reaccionar dos compuestos químicos es que estos lo hagan mediante cantidades finitas. En estas circunstancias se hace imprescindible el determinar cual de los reactivos se agotará antes en el transcurso de la reacción, pues cuando esto suceda la reacción dejará de tener lugar. A este reactivo se le conoce como *Reactivo Limitante*, y todos los cálculos estequiométricos serán referidos a éste.

Ejercicio 2.8 Se hacen reaccionar 15 gr de Hidrógeno con 17 gr de Oxígeno. Calcula la cantidad de agua formada

Siendo la reacción ajustada:

$$2H_2 + O_2 \longrightarrow 2H_2O$$

Calculamos después los moles de hidrógeno y de oxígeno que se hacen reaccionar:

n = 15 / 2 = 7,5 moles de Hidrógeno.

n = 17 / 32 = 0.53 moles de Oxígeno.

A continuación tomaremos como referencia el Hidrógeno y calculamos la cantidad del otro elemento que se necesitará para consumir totalmente dicho Hidrógeno:

$$\frac{2\ moles\ de\ H_2}{7,5\ moles\ de\ H_2} = \frac{1\ mol\ de\ O_2}{x\ moles\ de\ O_2}$$
 ; x = 3,75 moles de O_2

Como la cantidad real de O_2 que tenemos es sensiblemente menor (0,56 moles) podemos concluir que éste se acabará antes y por tanto, una vez agotado, la reacción se detendrá. Decimos que en esta reacción el O_2 es nuestro **Reactivo Limitante**. Ahora todos los cálculos lo hacemos referido a este reactivo:

$$\frac{1 \, mol \, de \, O_2}{0.53 \, moles \, de \, O_2} = \frac{2 \, moles \, de \, H_2O}{x \, moles \, de \, H_2O}$$
 ; x = 1,06 moles de H_2O

Por tanto se habrán formado $gr = 1,06 \cdot 18 = 19,08$ gr de H_2O

2.10.4 Pureza de Reactivos

Uno de los casos mas recurrentes de cálculos estequiométricos en química es cuando nos encontramos ante reactivos impuros, como por ejemplo la cantidad de un determinado compuesto en un mineral. En estos casos, la estequiometría se muestra clave a la hora de determinar la pureza de dichos compuestos

Ejercicio 2.9 Una muestra de 300 gr de caliza se descompone térmicamente para dar óxido de calcio y dióxido de carbono. Sabiendo que se obtienen 150 gr de óxido de calcio, determina la riqueza en carbonato de calcio de la caliza.

Escribimos y ajustamos la reacción:

$$CaCO_3 \longrightarrow CaO + CO_2$$

No podemos utilizar los 300 gr de caliza como dato puesto que no toda esa cantidad es $CaCO_3$. Pero si que sabemos que la reacción química solo intervienen reactivos puros, por lo que realizamos los cálculos estequiométricos. Obtenemos los moles de CaO

n = 150 / 56 = 2,68 moles de CaO.

Planteamos nuestra regla de tres:

$$\frac{1 \, mol \, de \, CaO}{2,68 \, moles \, de \, CaO} = \frac{1 \, mol \, de \, CaCO_3}{x \, moles \, de \, CaCO_3}; \, x = 2,68 \, moles \, de \, CaCO_3$$

Por lo que la cantidad de *CaCO*₃ puro que había inicialmente será:

$$gr = 2,68 \cdot 100 = 268$$
 gr de $CaCO_3$ puro.

Por tanto la pureza del reactivo será: (268 / 300) x 100 = 89,3 %

2.10.5 Rendimiento de una Reacción Química

Sabemos que en la práctica las cantidades obtenidas en el transcurso de una reacción química son siempre menores a las esperadas teóricamente. Esto es debido a multitud de factores, siendo el más importante el concepto de equilibrio químico que estudiaremos mas adelante. Por tanto, se define rendimiento de una reacción como el tanto por ciento de masa de producto obtenida con respecto a la teórica.

Ejercicio 2.10 La reacción 6,8 gr de H_2S con exceso de SO_2 produce 8,2 gr de S (reales) y agua. Calcula el rendimiento de la reacción.

Escribimos y ajustamos la reacción química:

$$2H_2S + SO_2 \longrightarrow 3S + 2H_2O$$

Calculamos los moles de H_2S que reaccionan y planteamos la regla de tres:

$$n = 6.8 / 34 = 0.2$$
 moles de H_2S

$$\frac{2 moesl de H_2 S}{0,2 moles de H_2 S} = \frac{3 moles de S}{x moles de S}$$
; x = 0,3 moles de S teóricos

Obtenemos la masa:

$$gr = 0, 3 \cdot 32 = 9, 6$$
 gr de S teóricos.

Vemos que la cantidad real obtenida es menor (8,2 gr) que la teórica (9,6 gr) Por tanto, el rendimiento de la reacción es:

$$(8,2/9,6) \times 100 = 85,4\%$$

2.11 Problemas 41

2.11 Problemas

Problema 2.1 El análisis de la clorofila muestra que tiene 2,68 % de magnesio. ¿Cuántos átomos de magnesio hay en un gramo de clorofila? (sol:6,64 · 10^{20} at. de Mg)

Problema 2.2 Calcula la masa en gamos de una molécula de amoniaco.($sol:2,82\cdot10^{-23}\ gr$)

Problema 2.3 Calcular en número de moléculas para las cantidades que se indican de las sustancias siguientes: a) 2,5 g de propanol, b) 89,6 l de metano medido a 0,5 atm. y 273 °C. (sol: a) 2,51·10²² molec. b) 6,02·10²³ molec.)

Problema 2.4 Un compuesto orgánico tiene 60% de C, 4,48% de H, y 35,5% de O. ¿Cuál es su fórmula empírica?($sol: C_9H_8O_4$)

Problema 2.5 Se sabe que los elementos presentes en la vitamina C, son: carbono, hidrógeno y oxígeno. En un experimento se quemaron exactamente 2 gramos de vitamina C, obteniéndose 3 g de dióxido de carbono y 0,816 g de agua. a) A partir de los resultados anteriores, establecer la fórmula empírica de la vitamina C. b) Se desconoce el peso molecular con precisión, pero se sabe que su valor está comprendido entre 150 y 200. Hallar la fórmula molecular de la vitamina $C.(sol: a) (C_3H_4O_3)_x$; $b) C_6H_8O_6)$

Problema 2.6 Un compuesto orgánico tiene la siguiente composición centesimal: C=24,25%, H=4,05%; Cl=71,8%.Un litro de dicho gas a 700 mm de Hg y a 110 °C tiene una masa de 3,085 g. Deducir su fórmula molecular.(sol: $C_2H_4O_2$)

Problema 2.7 Se disuelven 350 g de cloruro de cinc en 650 g de agua y se obtienen 740 mi de disolución. Se pide la concentración en: g/l, M, m, fracción molar de soluto y disolvente y % en peso de soluto. (sol: 472,97 g/l; 3,47 M; 3,95 mol/Kg; Xs=0,066; Xd=0,933; 35% (m/m))

Problema 2.8 ¿Cuál es la molalidad de una disolución que contiene 9,209 g de propanotriol disueltos en 50 g de agua? (sol: 2 mol/Kg)

Problema 2.9 Calcula los litros de disolución 2 M que se pueden preparar con 15 kg de formiato sódico.(sol: 110 l)

Problema 2.10 Se disuelven 30 gramos de ácido sulfúrico en el agua necesaria para preparar 250 ml de disolución, a) Calcula su molaridad. B) Se diluyen los 250 mi hasta un volumen do-

ble. Se toman 50 mi de la disolución resultante. Calcula las moléculas de sulfúrico que existirán en ellos.(sol: a) 1,22 M b) 1,84 · 10²² moléculas)

Problema 2.11 Calcula la molalidad y la fracción molar de una disolución de carbonato de amonio al 10% (m/m). (sol: a) 1,16 mol/Kg; b) $X_s = 0.02$)

Problema 2.12 Calcular los gramos de hidróxido de sodio y de agua necesarios para preparar 300 ml de disolución al 20% en NaOH cuya densidad es igual a 1,2 g/ml.(sol: 72 g; 288 g)

Problema 2.13 Se prepara una disolución mezclando 30 mi de agua, de densidad 1 g/ml, con 40 mi de acetona, de densidad 0,6 g/ml. La densidad de la disolución resultante es 0,9 g/ml. Calcular la concentración expresada en % en peso y la molaridad.(sol: 44,44%; 6,83 M)

Problema 2.14 Calcula la molaridad de un ácido sulfúrico comercial de d= 1,83 g/ml y 93,64 % de pureza. (sol: 17,84 M)

Problema 2.15 El HCl comercial tiene 37% de riqueza y d= 1,19 g/ml. ¿Qué cantidad de agua hay que añadir a 10 ml de dicho ácido para que resulte 0,1 M? (sol: 11196 ml)

Problema 2.16 Se mezclan 10 ml de una disolución 0,1 M de A con 15 ml de una disolución 0,2 M de B. ¿Cuáles son las nuevas concentraciones de A y B? (sol: A = 0,04 M; B = 0,12 M)

Problema 2.17 Se mezclan 150 mi de un ácido sulfúrico del 30% y de densidad d = 1,34 g/ml con 850 ml de otro ácido sulfúrico del 93% y de densidad 1,86 g/ml. La densidad de la disolución resultante es 1,60 g/ml. Calcular su molalidad y molaridad. (sol: 62,13 mol/Kg; 14 M)

Problema 2.18 Calcular el volumen de ácido clorhídrico 12 M que se necesita para preparar por disolución con agua 250 mi de una disolución 1,5 M de este ácido. (sol: 31,3 ml)

Problema 2.19 Explicar cómo se prepararían 60 ml de una disolución de nitrato de plata que contengan 0,03 g nitrato de plata por mililitro. (sol: 1,8 g)

Problema 2.20 ¿Qué volumen de ácido nítrico diluido de densidad 1,11 g/ml y 19% de riqueza contiene 10 g de ácido nítrico?(sol: 47,4 ml)

Problema 2.21 Se disuelven 5 g de nitrato de calcio en agua hasta completar 250 ml de di-

solución. Suponiendo que la sal se encuentra totalmente disociado, calcular: a) La concentración molar de nitrato de calcio, b) el volumen de disolución que contendrá 0,8 g de ión calcio. (sol: 0,12 M; 167 ml)

Problema 2.22 ¿Qué volumen de aire (21% de O_2 y 79% de N_2 , en volumen) que está a 17°C y 735 mm de Hg será necesario para realizar la combustión completa de 10,4 litros de acetileno (etino), medidos en condiciones normales? (sol: 136 ml)

Problema 2.23 Una muestra de 1,445 g de estaño se trata con flúor gaseoso hasta que se alcanza un peso constante de 2,360 g. a) Determina la fórmula del compuesto formado, b) ¿Qué volumen de gas flúor, medido en condiciones normales habrá reaccionado? (sol: a) SnF4; b) 0,54 l)

Problema 2.24 Al calentar nitrato sódico se descompone en nitrito sódico y oxígeno. Calcular cuál será la riqueza de un nitrato impuro si al calentar 60 g del mismo se producen 5500 cm³ de oxígeno medidos en C.N. (sol: 63,75%)

Problema 2.25 La combustión de etanol produce dióxido de carbono y agua. Calcular a) qué volumen de dióxido de carbono, en C.N., se obtendrá al quemar 11,5 g de alcohol. b) Cuántas moléculas de oxígeno serán necesarias para esa combustión.(sol: a) 11,2 l; 4,5 · 10²³ molec.)

Problema 2.26 Se tratan 200 g de carbonato de calcio con ácido clorhídrico suficiente para su reacción total. El dióxido de carbono formado se lleva a un vaso que contiene una disolución de hidróxido sódico dónde se supone reacciona por completo para dar carbonato de sodio, a) Escribir ajustadas las reacciones químicas que representan los dos procesos descritos (en ambas se forma agua), b) ¿Qué cantidad de hidróxido de sodio se necesita? (sol: 160 g NaOH)

Problema 2.27 Al quemar $40 cm^3$ de una mezcla de metano y propano, con suficiente cantidad de oxígeno, se producen $100 cm^3$ de dióxido de carbono. Calcular: a) La composición de la mezcla inicial; b) El volumen de oxígeno necesario para la combustión completa de la mezcla. (sol: a) V(met) = 10 ml, V(prop) = 30 ml; b) 170 ml)

Problema 2.28 Se calienta una muestra de 635 g de sulfato de cobre (II) pentahidratado hasta su descomposición completa en agua, trióxido de azufre y óxido de cobre (II). Calcular: a) El

volumen de vapor de agua desprendido a 200 °C y 550 mm de Hg b) Molaridad de la disolución de ácido sulfúrico que se obtendrá al recoger la totalidad de trióxido de azufre en agua, completando hasta un litro de disolución.(sol: a) 682 l; b) 2.55 M)

Problema 2.29 Calcula: a) La pureza de una muestra de sodio, sabiendo que cuando 10 g de la misma reaccionan con agua producen hidróxido sódico y se desprenden 4 litros de hidrógeno medidos a 25°C y 720 mm de Hg. b) La molaridad de hidróxido resultante, si el volumen total de la disolución es de 100 ml. (sol: a) 71,3%; b) 3,1 M)

Problema 2.30 El sulfato de amonio se obtiene industrialmente burbujeando amoniaco gaseoso a través de ácido sulfúrico diluido. Calcula: a) El volumen de amoniaco, a 20 °C y 700 mm de Hg, necesario para obtener 50 kg de sulfato de amonio del 80% de riqueza en peso.b) El volumen de ácido sulfúrico de densidad 1,40 g/ml y 50% de riqueza en peso, que se consumirá en dicha preparación. (sol: a) 1,58·10⁴ l; b) 42,4 l)

Problema 2.31 Se desea determina la pureza de un ácido acético comercial. Para ello se diluyen 60 g del mismo y a la disolución obtenida se le añaden 50 g de carbonato de calcio. Cuando cesa el desprendimiento de dióxido de carbono, se observa que quedan 2 g de carbonato de calcio sin reaccionar. Calcula la pureza del ácido acético comercial en tanto por ciento en peso. Reacción sin ajustar: $CH_3COOH + CaCO_3 \longrightarrow (CH_3COO)_2Ca + CO_2 + H_2O$ (sol: 39,6%)

Problema 2.32 29. Un globo meteorológico se llena con hidrógeno procedente de la reacción siguiente: $CaH_{2(s)} + H_2O_{(l)} \longrightarrow Ca(OH)_{2(aq)} + H_{2(g)}$ a) ¿Cuántos gramos de hidruro de calcio harán falta para producir 250 mi de hidrógeno en condiciones normales? b) ¿Qué volumen de HCl 0,1 M será necesario para que reaccione con todo el hidróxido de calcio formado? c) ¿Qué volumen adquirirá el globo si asciende hasta una zona donde la presión es de 0,5 atm y la temperatura -73 °C? (sol: a) 0,234 g; b) 112 ml; c) 365 ml)

Problema 2.33 El cianuro de hidrógeno, es un líquido incoloro, volátil, con el olor de ciertos huesos de frutas (por ejemplo los huesos de la cereza). El compuesto es sumamente venenoso. ¿Cuántas moléculas hay en 56 mg de cianu-

ro de hidrógeno, la dosis tóxica promedio?. (sol: 1,25·10²¹ molec. HCN)

Problema 2.34 ¿Cuántos gramos de metano hay en $1,20 \cdot 10^4$ moléculas?. $(sol: 3,19 \cdot 10^{-19} g)$ Problema 2.35 ¿Cuántos átomos de oxígeno hay en 1 g de O_2 , O_3 y de O?. $(sol: 3,76 \cdot 10^{22} átomos)$ Problema 2.36 ¿Qué volumen (ml) de una disolución de etanol (C_2H_6O) que tiene 94 % de pureza en masa, contiene 0.2 moles de etanol?. La densidad de la disolución es 0,807 g/ml. ¿Cuántos átomos de hidrógeno hay en 10 ml de etanol? (considera que es una disolución acuosa).(sol: a) 12,13 ml; b) $6,28 \cdot 10^{23}$ átomos)

Problema 2.37 Una aleación que contiene hierro (54,7% en masa), níquel (45,0%) y manganeso (0,3%) tiene una densidad de 8,17 g/ml. a) ¿Cuántos moles de hierro hay en un bloque de aleación que mide 10cm x 20cm x 15cm?.b) ¿Cuántos átomos de manganeso hay en la mitad del bloque que se menciona en el apartado anterior?. (sol: a) 240 moles át. Fe; b) 4,03 · 10²³ át. Mn)

Problema 2.38 La composición en tanto por ciento del acetaldehído es 54,5% de C, 9,2% de H y 36,3% de O, y su masa molecular es 44 g/mol. Determina la fórmula molecular del acetaldehído. ($sol: C_2H_4O$)

Problema 2.39 El óxido de titanio (IV) se calienta en corriente de hidrógeno perdiendo algo de oxígeno. Si después de calentar 1,598 g de óxido de titanio (IV), el peso se reduce en 0,16 g ¿Cuál es la fórmula del producto final? (sol: Ti₂O₃) Problema 2.40 Al quemar una muestra de un hidrocarburo (compuesto formado por carbono e hidrógeno) se producen 12,28 g de dióxido de carbono y 5,86 g de agua, a) ¿Cuántos gramos de muestra se quemaron? b) ¿Cuál es la composición centesimal de cada elemento en el compuesto? c) ¿Cuál es la fórmula empírica del compuesto orgánico? (sol: a: 4 g; b) 83,7 y 13,6% de C e H; c) C₃H₇)

Problema 2.41 Se determinó que un compuesto orgánico contiene solo 3 elementos: carbono, hidrógeno y cloro. Cuando se quemó por completo en el aire una muestra de 1,5 gramos del compuesto, se produjeron 3.52 g de dióxido de carbono. En otro experimento, el cloro de una muestra de un gramo del compuesto, se transformó en 1,27 gramos de cloruro de plata. a) ¿Cuál es la masa en gramos que hay de cada elemento

en 1,5 gramos de muestra del compuesto mencionado? b) ¿Cuál es la composición porcentual de cada elemento en el compuesto? c) ¿Cuál es la fórmula empírica para esta sustancia orgánica?(sol: a) 0,96 g C; 0,075 g H; 0,465 g Cl; b) 64%, 5% y 31%; c) C₆H₅Cl)

Problema 2.42 La vitamina E tiene 11,21% en masa de hidrógeno. Si un mol de vitamina E contiene 3,01·10²⁵ átomos de hidrógeno a) ¿Cuál es la masa molar de la vitamina E? b) ¿Cuántos átomos de hidrógeno hay por molécula de vitamina E? (sol: a) 446 g/mol; b) 40

Problema 2.43 La etiqueta de un frasco de 250 ml de un insecticida indica que el frasco contiene 0,1 % en masa, de $C_{12}H_{11}NO_2$, ¿Cuántas moléculas de $C_{12}H_{11}NO_2$ hay en el frasco, suponiendo que la solución tiene una densidad de 1,0 g/ml? (sol: 7,48 · 10²⁰ moléculas)

Problema 2.44 Un tubo de ensayo contiene 25 ml de agua. Calcula: a) El número de moléculas de agua que hay en él. b) El número total de átomos de hidrógeno que hay contenidos en esas moléculas de agua. c) La masa, en gramos, de una molécula de agua. Dato: Densidad del agua = 1 g/ml (sol: a) 8,36·10²³ molec.; b) 1,67·10²³ átomos; c) 3·10²³ g)

Problema 2.45 Se tiene una disolución de sosa cáustica (NaOH) 0,6 M. determina el volumen necesario de una disolución de sosa cáustica de densidad 1,2 g/mL y riqueza 24% que se deberá agregar a 11 de la primera disolución para que resulte finalmente una disolución 0,75 M. Considera que los volúmenes son aditivos. (sol: 23,25 m/

Problema 2.46 Se tiene un litro de una disolución de ácido sulfúrico del 98% de riqueza y densidad de 1,84 g/ml. Calcula: a) la molaridad y la molalidad; b) el volumen de esa disolución necesario para preparar 100 ml de otra disolución del 20% y densidad 1,14 g/ml (sol: a) 18,4 M; 500 mol/Kg; b) 12,6 ml)

Problema 2.47 Se hacen reaccionar 10 gramos de cinc metálico con ácido sulfúrico en exceso. Calcula: a) el volumen de hidrógeno que se obtiene, medido a 27 °C y 740 mm de Hg; b) La masa de sulfato de cinc formada si la reacción tiene un rendimiento del 80 %. (sol: a) 3,8 l; b) 19,4 g) Problema 2.48 El cloro se obtiene en el laboratorio por reacción del ácido clorhídrico con el

dióxido de manganeso. En el proceso también se obtiene cloruro de manganeso (II) y agua. A) Escribe la reacción ajustada; B) Calcula el volumen de disolución de ácido clorhídrico de densidad 1,15 g/cc y 30 % en masa necesarios para obtener 10 1 de gas cloro, medidos a 30 °C y 1 atm de presión. (sol: a) $^{4}HCl + MnO_{2} \longrightarrow Cl_{2} + MnCl_{2} + ^{2}H_{2}O$: b) $^{170,3} ml$)

Problema 2.49 Se calienta una muestra de mineral de 2,00 gramos que contiene carbonato cálcico y dióxido de silicio hasta obtener una masa constante de 1,34 g. El carbonato cálcico se descompone en dióxido de carbono gaseoso y óxido de calcio, mientras que el dióxido de silicio se mantiene inalterado. Calcula la riqueza en % del carbonato cálcico en la muestra. (sol: 75%)

Problema 2.50 Se mezclan 100 ml de HCl 0,2 M, 400 ml de HCl 0,1 M y 250 ml de agua destilada. Calcula la molaridad de la disolución resultante. Suponer que los volúmenes son aditivos. (sol: 0,08 M)

Problema 2.51 Una muestra de 2 g que contiene Al y SiO_2 es tratada con HCl en exceso recogiéndose 275 ml de H_2 gas saturado con vapor de agua a 27 °C y 768 mm de Hg de presión. Calcula: a) ¿cuántos gramos de hidrógeno y de agua contiene el gas?; b) Calcula la riqueza del aluminio en la muestra. Datos: Presión de vapor del agua a 27 °C: 21 mm de Hg; el SiO_2 no es alterado por el HCl. $(Al + SiO_2) + HCl \longrightarrow AlCl_3 + SiO_2 + H_2$ (sol: a) 5,56·10⁻³ g H_2O y 2,2·10⁻² g de H_2 ; b) 10%)

Problema 2.52 Un compuesto orgánico contiene carbono, hidrógeno y oxígeno. Cuando se queman 15 gramos de compuesto se obtienen 22 gramos de dióxido de carbono y 9 gramos de agua. La densidad del compuesto en estado gaseoso, a 150 °C y 780 mm de Hg es 1,775 g/l. Calcula la fórmula molecular del compuesto.(sol: $C_2H_4O_2$)

Problema 2.53 Se mezclan 2 litros de acetileno (etino) y 9 litros de oxígeno medidos en las mismas condiciones. Se produce la combustión completa del acetileno y se vuelve a las condiciones iniciales, quedando el agua en estado gaseoso. Calcula: a) El volumen de la mezcla gaseosa final; b) Su composición en % en volumen; c) Su

composición en % en masa. (sol: 1) a) 10 l; b) 40 % O_2 ; 40 % CO_2 ; 20 % H_2O ; c) 37,64 % O_2 ; 51,76 % CO_2 ; 10,6 % H_2O) Problema 2.54 La combustión completa de una muestra de hidrocarburo gaseoso produjo 3 l de dióxido de carbono y 4 l de vapor de agua medidos a 27 °C y 1,23 atm. Calcula la fórmula del hidrocarburo.(sol: C_3H_8)

Problema 2.55 La combustión completa de 1,50 gramos de propano produjo 1030 mL de dióxido de carbono, medidos en condiciones normales de presión y temperatura. ¿Cuál es el rendimiento de la reacción? (sol: 45%)

Problema 2.56 55. Cuando se agregó una gran cantidad de agua sobre 100 g de carburo de calcio se produjeron 28,3 g de acetileno, según la reacción (no balanceada):

$$CaC_2 + 2H_2O \longrightarrow Ca(OH)_2 + C_2H_2$$

a) Calcule el porcentaje de rendimiento de la reacción. b) ¿Cuál sería el reactivo limitante si 100 g de carburo de calcio reaccionaran con 100 g de agua? (sol: 69,7%; b) CaC₂)

Problema 2.57 En un recipiente de 5 litros de capacidad se introducen 10 g de hidrógeno y 20 g de nitrógeno a temperatura de 27 °C y se hace reaccionar la mezcla para formar amoniaco. Determina: a) Porcentaje del reactivo que queda sin reaccionar. b) Presión del recipiente cuando ha reaccionado el 40 % del reactivo limitante. c) Masa de amoniaco formada. (sol: a) 57 % del H inicial; b) 25,2 atm; c) 24,1 g)

Problema 2.58 En la reacción del carbonato de calcio con ácido clorhídrico se utiliza una caliza del 92% de riqueza. a) ¿Qué cantidad de caliza se necesita para obtener 250 kg de cloruro de calcio? b) Si el ácido utilizado es del 70% de riqueza y densidad $1,42 \text{ g/cm}^3$ ¿cuántos litros de este ácido serán necesarios? (sol: a) 245 kg de caliza; b) 165,41)

Problema 2.59 Una mezcla de 100 kg de CS_2 y 200 kg de Cl_2 se pasa a través de un tubo de reacción y calentado se produce la reacción:

$$CS_2 + 3Cl_2 \longrightarrow CCl_4 + S_2Cl_2$$

- a) El reactivo que no reacciona completamente.
- b) La cantidad de este reactivo que no reacciona.
- c) El peso de S_2Cl_2 que se obtiene. (sol: a) CS_2 ; b) No reaccionan 27 Kg)



3.1 Introducción

La **Termodinámica** es la parte de la Física que se ocupa del estudio de las relaciones que se establecen entre el calor y el resto de las formas de energía. Entre otras cuestiones la termodinámica se ocupa de analizar los efectos que producen los cambios de magnitudes tales como la temperatura, la densidad, la presión, la masa, el volumen, en los sistemas y a un nivel macroscópico. La base sobre la cual se ciernen todos los estudios de la termodinámica es la circulación de la energía y como ésta es capaz de infundir movimiento. Vale destacar que justamente esta cuestión fue la que promovió el desarrollo de esta ciencia, ya que su origen se debió a la necesidad de aumentar la eficiencia de las primeras máquinas de vapor.

Los primeros estudios termodinámicos se deben al ingeniero francés *Nicolas Sadi Carnot* (1796-1832), quien en 1824 publico un libro titulado *Reflexiones sobre la Fuerza Motriz del Fuego*, donde abordaba la eficiencia de las máquinas de vapor que se utilizaban en la época y los máximos rendimientos que se podían alcanzar con una máquina térmica ideal a la cual se llamó **Maquina de Carnot**.

Las conclusiones obtenidas por Carnot y sus sucesores fueron tan generales y simples que la termodinámica se ha establecido como una disciplina general que se ocupa de describir cómo los sistemas responden a los cambios que se producen en su entorno, pudiéndose aplicar a una infinidad de situaciones tanto de la ciencia como de la ingeniería, como pueden ser: motores, reacciones químicas, transiciones de fase, fenómenos de transporte, agujeros negros... entre otras.

3.2 Termoquímica

Se define **Termoquímica** como la parte de la Química que estudia las transferencias energéticas en el transcurso de una reacción química. Dicha energía se manifiesta mayoritariamente en forma de calor, por lo que se puede resumir la termoquímica como la parte de la química que estudia el intercambio calorífico que tiene lugar en una reacción química. Como dicho calor tiene que ver con

el contenido de energético de los compuestos químicos intervinientes en el proceso, y teniendo en cuenta que todo sistema químico tiende al estado de mínima energía, la termoquímica se encarga también del estudio de la espontaneidad de las reacciones químicas.

3.3 Sistema Termodinámico

Se define **Sistema Termodinámico** como una porción del universo físico que se aísla para su estudio. A la porción del universo físico que se encuentra en contacto con nuestro sistema se le denomina **Entorno**. Los sistemas termodinámicos se clasifican según el grado de aislamiento que presentan con su entorno. Aplicando este criterio pueden darse tres clases de sistemas:

- Sistema aislado: Es aquel que no intercambia ni materia ni energía con su entorno, es decir se encuentra en equilibrio termodinámico. Un ejemplo de esta clase podría ser un gas encerrado en un recipiente de paredes rígidas lo suficientemente gruesas (paredes adiabáticas) como para considerar que los intercambios de energía calorífica sean despreciables y que tampoco puede intercambiar energía en forma de trabajo.
- Sistema Cerrado: Es aquel que puede intercambiar energía pero no materia con el exterior. Multitud de sistemas se pueden englobar en esta clase. El mismo planeta Tierra puede considerarse un sistema cerrado. Una lata de sardinas también podría estar incluida en esta clasificación.
- Sistema Abierto: En esta clase se incluyen la mayoría de sistemas que pueden observarse en la vida cotidiana. Por ejemplo, un vehículo motorizado es un sistema abierto, ya que intercambia materia con el exterior cuando es cargado, o su conductor se introduce en su interior para conducirlo, o es provisto de combustible al repostarse, o se consideran los gases que emite por su tubo de escape pero, además, intercambia energía con el entorno. Solo hay que comprobar el calor que desprende el motor y sus inmediaciones o el trabajo que puede efectuar acarreando carga.

Puesto que la gran mayoría de reacciones químicas tienen lugar en disolución, es decir, en un vaso de precipitados, los sistemas químicos se consideran en su mayor parte como *sistemas abiertos*.

3.4 Variables de Estado

Una vez determinados los límites de un sistema termodinámico objeto de estudio o investigación, se procede a determinar y cuantificar su estado. En Termodinámica, se denominan *Variables de Estado* a aquellas variables que caracterizan un sistema. Dichas variables son variables macroscópicas, perfectamente medibles en un laboratorio por métodos simples y que caracterizan un estado microscópico concreto. Por ejemplo, en un sistema termodinámico formado por un gas, las variables de estado son la *Presión, Volumen y Temperatura*.

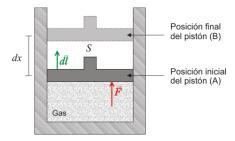
Las variables de estado tienen una característica fundamental e importantísima en un proceso: **Solo dependen de los estados inicial y final del sistema, nunca del proceso seguido**. Esto es de una importancia vital a la hora de estudiar un sistema químico, pues durante una reacción química las variables de estado van a depender exclusivamente de los estados inicial y final, esto es, reactivos y productos, simplificando enormemente el tratamiento teórico de los mismos.

3.5 Primer Principio de la Termodinámica

Pasamos ahora a estudiar el Primer Principio de la Termodinámica que es una generalización del Principio de Conservación de la Energía Mecánica

3.5.1 Concepto de Trabajo Termodinámico

Consideraremos el caso de un gas ideal encerrado en un cilindro con émbolo movil. En cierto momento aumenta la presión en el interior del recipiente y el gas se expande efectuando un trabajo al desplazar el émbolo hacia arriba una longitud infinitamente pequeña (dx). Por tanto, el trabajo efectuado por dicho gas será:



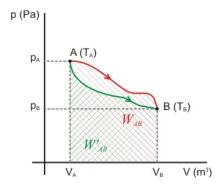
Definición 3.5.1 — Trabajo Termodinámico. Se define en física el trabajo que efectúa una fuerza al desplazar un objeto un elemento dx como:

$$W = \int_{x_1}^{x_2} F \cdot dx \tag{3.1}$$

Sabiendo que $F = P \cdot S$ y que $dV = S \cdot dx$, podemos expresar el trabajo termodinámico en función de las variables de estado de un gas ideal:

$$W = \int_{V_1}^{V_2} P \cdot dV \tag{3.2}$$

Se puede interpretar geométricamente el trabajo como el área encerrada bajo la curva de la gráfica presión-temperatura de un gas ideal.



De esta gráfica se puede deducir una consecuencia muy importante. En efecto si analizamos en detalle la gráfica anterior nos daremos cuenta de que el área encerrada bajo la curva es distinta en el proceso de color rojo que en el proceso de color verde, aunque los estados inicial y final de ambos procesos sean los mismos. El Trabajo no es una función de estado de un sistema termodinámico.

3.5.2 Energía Interna

Se puede entender la **Energía Interna** (U) en Termodinámica como la medida macroscópica de la energía microscópica de las moléculas que componen un sistema. Se puede considerar como la suma de:

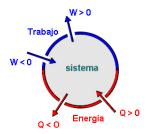
- Energía Cinética Interna, es decir, de las sumas de las energías cinéticas de las individualidades que lo forman respecto al centro de masas del sistema.
- Energía Potencial Interna, que es la energía potencial asociada a las interacciones entre estas individualidades.

La energía interna no incluye la energía cinética traslacional o rotacional del sistema como un todo. Tampoco incluye la energía potencial que el cuerpo pueda tener por su localización en un campo gravitacional o electrostático externo. Por tanto, es una Energía que no es accesible desde el punto de vista de la mecánica clásica.

Como se puede observar, la energía interna solo depende de la configuración macroscópica del sistema, por lo que también es una *función de estado* del mismo.

3.5.3 Criterio de Signos

Para la formulación del primer principio, debemos de establecer un criterio de signos a la hora de evaluar los intercambios de energía que se producen entre el sistema y el entorno en términos de calor y trabajo. Así, nosotros estableceremos el Criterio Clásico:



Como podemos observar el calor que se cede del sistema al entorno lo tomaremos como negativo, mientras que el trabajo que realiza el sistema sobre el entorno lo tomaremos a su vez como positivo.

3.5.4 Primer Principio de la Termodinámica

El primer principio de la Termodinámica qué enunciado en 1850 por **Clasius** y **Lord Kelvin**, y es una generalización del Principio de Conservación de la Energía expresado en términos de trabajo y calor. Su enunciado sería:

Definición 3.5.2 — Primer Principio de la Termodinámica. El aumento de Energía Interna de un Sistema Termodinámico es igual a la diferencia entre el calor aplicado y el trabajo realizado.

$$\Delta U = Q - W \tag{3.3}$$

O también podemos expresarlo de forma diferencial:

$$dU = dQ - dW = dQ - PdV (3.4)$$

Para un proceso isocórico (a V=cte.) dV = 0, por lo que se queda:

$$dU = dQ_v$$

Definición 3.5.3 — Interpretación de la Energía Interna. La Energía Interna de un Sistema Termodinámico se puede interpretar como el calor intercambiado en un proceso a Volumen Constante

3.6 Concepto de Entalpía

El principal problema que encontramos a la hora de tratar el calor es que éste no es Función de Estado del Sistema. Sería muy interesante encontrar una magnitud calorífica que fuese variable de estado del sistema, pues en el caso de un proceso químico, esta dependería solo del estado final e inicial del proceso, es decir, de los reactivos y productos.

Definición 3.6.1 Se define Entalpía (en griego, "agregar calor") como:

$$H = U + P \cdot V \tag{3.5}$$

Como podemos observar, U, P y V son variables de estado del sistema, por lo que H también lo es. Si diferenciamos la ecuación obtenemos:

$$dH = dU + PdV + VdP$$

Despejando el calor del enunciado del Primer Principio:

$$dQ = dU + PdV$$

Como podemos observar, las dos expresiones anteriores son coincidentes en el caso de que hagamos dP = 0, es decir, tengamos un proceso Isobárico (a P = cte). En ese caso se obtiene:

$$dH = dQ_P$$

Puesto que a mayoría de reacciones químicas se realizan a presión constante (la atmosférica), utilizaremos la entalpía para calcular los calores intercambiados en una reacción química.

3.7 Entalpía Estándar de Reacción: Diagramas Entálpicos

Uno de los factores que más nos interesa estudiar de una reacción química es el de calor que desprende o absorbe un proceso. Según lo visto en el apartado anterior, introducimos el concepto de *Entalpía de Reacción*

Definición 3.7.1 — Entalpía de Reacción. Se define Entalpía de Reacción ΔH_r como el calor absorbido o desprendido en una reacción química cuando ésta transcurre a Presión constante

Como los valores de Entalpía de Reacción van a depender de la Presión y la Temperatura, para simplificar los cálculos vamos a definir unas condiciones que tomaremos como referencia a la hora de tabular y de tratar de manera numérica, las denominadas *Condiciones Estándar*

Definición 3.7.2 — Condiciones Estándar Termodinámicas. Se definen las Condiciones Estándar Termodinámicas como aquellas que corresponden con un Temperatura de 298 K y una Presión de 1 atm.

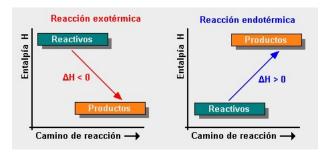
Realmente los que conocemos como Entalpía de Reacción es la diferencia de entalpía (incremento) entre reactivos y productos:

$$\Delta H_r^0 = H_{Productos}^0 - H_{Reactivos}^0$$

Puesto que la entalpía es una función de estado y además representa al calor de reacción a presión constante (que no olvidemos es energía) las entalpías van a depender del contenido energético de reactivos y productos. Por tanto, en una reacción química nos podemos hallar ante dos situaciones:

- Que el contenido energético de los productos sea menor que en los reactivos. En ese caso al final de una reacción química habrá un exceso de energía que se transmitirá al entorno en forma de calor. A dicho proceso se le conoce como **Proceso Exotérmico** ($\Delta H_r^0 < 0$)
- Que el contenido energético de los productos sea mayor que en los reactivos. En ese caso al final de una reacción química se necesitará un aporte de energía (calor) del medio para que ésta tenga lugar. A dicho proceso se le conoce como **Proceso Endotérmico** ($\Delta H_r^0 > 0$)

Una manera muy útil de ilustrar este proceso es mediante los denominados *Diagramas Entálpicos*:



Por norma general, se suelen nombrar las entalpías con el nombre del tipo de reacción química presente. Así hablaremos de entalpía de combustión, de hidrólisis, de hidratación....etc.

3.8 Cálculo de Entalpías de Reacción

En los siguientes apartados estudiaremos los métodos mas utilizados para el cálculo de entalpías de reacción.

3.8.1 Entalpías Estándas de Formación

Se define **Entalpía Estándar de Formación** como el calor necesario para formar 1 mol de compuesto químico a partir de sus elementos en su estado mas estable (esto es, estado de agregación

y forma alotrópica mas estables). Sus unidades en el SI es el J/mol, aunque por su magnitud se suele emplear el KJ/mol.

$$2C_{(s)Grafito} + 2H_{2(g)} \longrightarrow 2C_2H_{2(g)}$$
 $\Delta H_f^0 = +54 \text{ KJ/mol}$

Como en las Entalpías solo podemos calcular sus incrementos y, por tanto, carecemos de una escala absoluta de las mismas, asumiremos por convenio que:

Definición 3.8.1 Las Entalpías de Formación de los Elementos Químicos puros que se hallen en su estado mas estable tienen valor 0.

Este convenio establecido, y el hecho de que la Entalpía es una función de estado hace que el cálculo de calores de reacción a partir de sus calores de formación sea muy sencillo, puesto que las entalpías de formación de la mayoría de compuestos químicos en condiciones estándar se encuentran tabuladas:

$$\Delta H_r^0 = \sum_{i=1}^{N} (n_i \Delta H_f^0)_{Productos} - \sum_{i=1}^{N} (n_i \Delta H_f^0)_{Reactivos}$$

Ejercicio 3.1 A partir de los Calores de Formación correspondientes, calcula la Entalpía Estándar de la reacción:

$$CO_g + 1/2O_2 \longrightarrow CO_{2(g)}$$

Consultando la tabla de los Calores de Formación presentes en los anexos, encontramos los siguientes valores:

$$\Delta H_f^0[CO_2] = 393,5 \ KJ/mol$$
 $\Delta H_f^0[CO_2] = -110,5 \ KJ/mol$

Como podemos observar no encontramos la entalpía de formación del O2. Esto es debido a que es un elemento químico (gas diatómico) que se encuentra en su estado más estable. Por tanto la entalpía de la reacción será:

$$\Delta H_r^0 = [1 \cdot 393, 5] - [1 \cdot (-110, 5) + 1/2 \cdot 0] = 504 \, KJ$$

3.8.2 Entalpías de Enlace

Puesto que una reacción química no es mas que una reordenación de los átomos que constituyen la materia (esto es, una ruptura y formación de enlaces sincrónica) y puesto que el contenido energético de los reactivos y productos dependen casi exclusivamente de sus enlaces, podemos tabular dicho contenido energético para poder calcular las entalpías de reacción. Esto es práctico sobre todo en el caso de compuestos orgánicos, a los que nos ceñiremos casi exclusivamente.

Así la entalpía de una reacción química será:

$$\Delta H_r^0 = \sum_{i=1}^{N} (n_i \Delta H_e^0)_{Rotos} - \sum_{i=1}^{N} (n_i \Delta H_f^0)_{Formados}$$

Cabe resaltar que las entalpías de reacción calculadas por este método son menos exactas que las calculadas por otros métodos vistos aquí.

En los Anexos se encuentran las entalpías de los enlaces más comunes en Química.

Ejercicio 3.2 Considérese la reacción de hidrogenación del propino:

$$CH_2 = CH - CH_3 + H_2 \longrightarrow CH_3 - CH_2 - CH_3$$

Calcule la entalpía de reacción a partir de sus entalpías de enlace

Hacemos un balance de todos los enlaces rotos y formados en el transcurso de la reacción química:

Rotos: 1 C=C;6 C-H; 1 H-H; 1 C-C;

Formados: 3 C-C; 8 H-H;

Hacemos el Balance:

$$\Delta H_r^0 = [1.610 + 6.415 + 1.436 + 1.347] - [3.347 + 8.436] = -646 \, KJ$$

3.8.3 Ley de Hess

La Ley de Hess es una consecuencia lógica del hecho de que la Entalpía sea una función de estado del sistema. Esta dice:

Ley 3.8.1 Ley de Hess Cuando una Reacción Química se puede expresar como una combinación de otras, las entalpías respectivas siguen la misma relación

Ejercicio 3.3 Calcula la Entalpía de la Reacción:

$$C_{(s)}$$
 + $CO_{2(g)}$ \longrightarrow $2CO_{(g)}$

Sabiendo que:

$$CO_{(g)} + 1/2O_{2(g)} \longrightarrow CO_{2(g)}$$
 (a)

$$C_{(s)} + O_{2(g)} \longrightarrow CO_{2(g)}$$
 (b)

Como podemos observar, la reacción problema se puede expresar en función de las dos dadas:

$$-2\cdot (CO_{(g)}\,+\,1/2O_{2(g)}\longrightarrow CO_{2(g)})$$

$$C_{(s)} + O_{2(g)} \longrightarrow CO_{2(g)}$$

$$\frac{C_{(s)} + O_{2(g)} \longrightarrow CO_{2(g)}}{C_{(s)} + CO_{2(g)} \longrightarrow 2CO_{(g)}}$$

Luego las entalpías de reacción seguirán la misma relación:

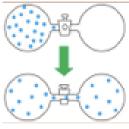
$$\Delta H_r^0 = -2 \cdot \Delta H_a^0 + \Delta H_b^0 = 172,5 \text{ KJ}$$

3.9 Segundo Principio de la Termodinámica

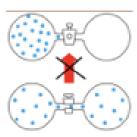
3.9.1 Insuficiencia del Primer Principio

Cuando estudiamos los distintos sistemas físicos, caemos en la cuenta de el Primer Principio se torna totalmente insuficiente a la hora de explicar la espontaneidad de ciertos procesos naturales.

Por ejemplo, considérese un gas encerrado en un recipiente unido a otro vacío por una llave. Si accionamos dicha llave, vemos como el gas tiende a ocupar todo el volumen de ambos recipientes distribuyéndose uniformemente. Sin embargo, el proceso inverso no ocurrirá nunca, aunque ambas situaciones estén en consonancia con el Primer Principio.



(a) Proceso No Espontáneo



(b) Proceso Espontáneo

Es por ello que es necesario introducir un nuevo principio básico de la termodinámica que nos indique la evolución de los sistemas físicos.

3.9.2 Concepto de Entropía

Se define *Entropía* (del griego, "transformación o "evolución") como la magnitud física que mide la parte de la energía inutilizable de un sistema, esto es, aquella que no es susceptible de ser transformada en trabajo. Fue introducida por *R. Clausius* en la década de 1850 para explicar la espontaneidad de los procesos que tienen lugar dentro de las máquinas térmicas.

Definición 3.9.1 — Entropía de un Sistema. Se define matemáticamente la Entropía como:

$$dS = \frac{dQ}{T} \tag{3.6}$$

O de Forma Finita:

$$\Delta S = \int_{1}^{2} \frac{dQ}{T} \tag{3.7}$$

Sus unidades en el SI son el J/K

3.9.3 Segundo Principio de la Termodinámica

El Segundo Principio de la Termodinámica o Principio de Evolución rige la espontaneidad de los Sistemas Físicos utilizando para ello el concepto de entropía

Definición 3.9.2 — Segundo Principio de la Termodinámica. En un Sistema Termodinámico aislado, la Entropía de un proceso espontáneo siempre aumenta.

Como podemos observar, este enunciado pone inmediatamente de manifiesto su principal característica: se trata de una de las pocas leyes ontológicas de la Física, en tanto que distingue, de manera general, aquellos procesos y estados físicos que son posibles de aquellos que no lo son; esto es, el segundo principio permite determinar la posibilidad de un proceso o estado. De hecho, en un sentido histórico el segundo principio surgió, en plena Revolución Industrial en el contexto de las máquinas térmicas como una explicación empírica de por qué éstas se comportaban de una manera determinada y no de otra. En efecto, aunque parezca trivial, siempre se observaba, por ejemplo, que para calentar una caldera era necesario emplear combustible ardiendo a mayor temperatura que la de la caldera; sin embargo, jamás se observaba que la caldera se calentara tomando energía de su entorno, el cual a su vez se enfriaría. De hecho, podría razonarse que, en virtud del Primer Principio, nada impide que, espontáneamente, sea posible extraer calor de un cuerpo frío, por ejemplo a 200K, para transmitírselo a otro caliente, por ejemplo a 1000 K: basta con que se cumpla el balance energético correspondiente, a consecuencia del cual el cuerpo frío se enfriaría aún más, y el caliente se calentaría más aún. Sin embargo, todo esto es contrario a toda experiencia; y aunque parezca común y hasta trivial, tenía un extraordinario impacto en las máquinas empleadas en la Revolución Industrial.

Sin embargo, el Segundo Principio plantea dos problemas: El primero es el hecho de que el concepto de Entropía carece de una interpretación física. Es una magnitud que se deduce de observaciones experimentales, pero no corresponde a ningún observable físico.

El segundo problema es que el Segundo Principio sólo es aplicable a sistemas aislados. Es muy difícil encontrar un sistema termodinámico real que se pueda considerar aislado. De hecho, el único sistema que se puede considerar considerado es el universo en si. Por tanto, una formulación mas general del Segundo Principio sería:

Definición 3.9.3 — Segundo Principio de la Termodinámica (Formulación 2). La Entropía del Universo siempre Aumenta

3.9.4 Interpretación Molecular de la Entropía: Ecuación de Boltzmann

En los años 1890-1900, el físico austriaco **Ludwig Boltzmann** (1844-1906) intentó relacionar la entropía como variable macroscópica con los sucesos que ocurren en un Sistema Termodinámico a nivel microscópico, utilizando para ello una herramienta que posteriormente fue llamada Mecánica Estadística. Así, encontró la llave que unía ambos mundos (macroscópico y microscópico) en la siguiente ecuación:

Definición 3.9.4 — Ecuación de Boltzmann. La entropía de un Sistema Macroscópico es directamente a los Microsestados microscópicos de dicho Sistema:

$$S = K_B \cdot \ln \Omega \tag{3.8}$$

Donde K_B es la denominada Constante de Boltzmann, cuyo valor es $K_B = 1,38 \cdot 10^{-23} J/K$

El descubrimiento de esta ecuación hizo posible interpretar la Entropía como el Desorden de un sistema. Por ejemplo, si dejamos caer un vaso de cristal al suelo, este se romperá en muchos pedazos aumentando el desorden del sistema (y por tanto la entropía). En el caso del gas encerrado en el émbolo, el proceso espontáneo será aquel en el que el gas contenido en un solo recipiente

ocupa todo el volumen del mismo, aumentando su desorden. El proceso contrario (que el gas se desplace totalmente hacia uno de los émbolos dejando el otro totalmente vacío disminuye el desorden del sistema, por lo que será un proceso no espontáneo.

3.10 Tercer Principio de la Termodinámica

La ecuación de Boltzmann no solo nos permite interpretar la entropía como el desorden de un sistema, sino que también nos permite establecer una escala de entropías molares para el cálculo de las mismas, de lo que se ocupa el Tercer Principio de la Termodinámica.

Definición 3.10.1 — Tercer Principio de la Termodinámica. La Entropía de un Cristal Perfecto en el Cero Absoluto es Cero

3.10.1 Tercer Prinncipio de la Termodinámica

En efecto, en un cristal perfecto en el cero absoluto se considera que $\Omega=1$ y por tanto, según la ecuación de Boltzmann S=0 J/K. Esto, unido al hecho de que la Entropía es función de estado del sistema, hace posible el poder tabular las Entropías (al igual que ocurría con las entalpías de formación) para poder abordar su cálculo de manera sencilla.

3.10.2 Cálculo de Entropías

A partir del Tercer Principio de la Termodinámica es muy fácil calcular entropías de reacción según la ecuación:

$$\Delta S^{0} = (\sum_{i=1}^{N} n_{i} \cdot S^{0})_{Productos} - (\sum_{i=1}^{N} n_{i} \cdot S^{0})_{Reactivos}$$

Ejercicio 3.4 Calcula la Variación de Entropía Estándar de la Reacción:

$$2SO_{3(g)} \longrightarrow 2SO_{2(g)} + O_{2(g)}$$

Sabiendo que las Entropías molares Estándar son $S^0(J/mol\cdot K)$: $SO_{3(g)}=252,6;\ SO_{2(g)}=248,5;\ O_{2(g)}=204,8$

$$\Delta S^0 = 1 \cdot 204, 8 + 2 \cdot 248, 5 - 2 \cdot 252, 6 = 196, 6 J/K$$

3.11 Espontaneidad de las Reacciones Químicas

El Segundo Principio de la Termodinámica es insuficiente para determinar la espontaneidad de las reacciones químicas. Y esto es debido a que es muy difícil encontrar un sistema termodinámico que sea totalmente cerrado (de hecho en la práctica solo el universo lo es). Una reacción química generalmente se realiza en un vaso de precipitado abierto y a presión constante (la atmosférica). Por tanto se hace indispensable encontrar una magnitud que sea capaz de predecir la espontaneidad de las reacciones químicas en procesos isobáricos.

Hemos visto en apartados previos que en una reacción química hay dos fuerzas impulsoras diferenciadas. Por una parte, se ve favorecido el sentido de la reacción en el que hay una disminución de entalpía de reactivos a productos, es decir, el sentido exotérmico, mientras que, por otra parte, se favorece el sentido de la reacción en el que hay un aumento de entropía, $\Delta S > 0$, es decir, un aumento del desorden. De ambos factores, ΔH y ΔS , dependerá que una reacción química sea espontánea o no espontánea.

Definición 3.11.1 — Energía Libre de Gibbs. Se define la *Energía Libre de Gibbs (G)* como la diferencia entre la Entalpía y el producto de la Entropía por la temperatura. Matemáticamente:

$$G = H - T \cdot S$$

Fue introducida en la década de 1870 por el estadounidense *Williard Gibbs (1839-1903)*, es una Función de Estado del Sistema y sus unidades en el SI son el J/mol.

3.11.1 Cálculo de Energías Libres de Gibbs

El cálculo de Energias Libre de Gibbs se puede realizar de dos maneras:

1. Conociendo las Entalpías y Entropías de una Reacción Química. En ese caso, a P y T constantes podemos afirmar que:

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

2. A partir de las Energías Libre de Gibbs de Formación Estándar, que se hayan tabuladas en los anexos puesto que esta magnitud es una Función de Estado del Sistema:

$$\Delta G^0 = (\sum_{i=1}^{N} n_i \cdot \Delta G_f^0)_{Productos} - (\sum_{i=1}^{N} n_i \cdot \Delta G_f^0)_{Reactivos}$$

3.11.2 Crtierio de Espontaneidad de las Reacciones Químicas

Puesto que la Energía Libre de Gibbs no es sino una medida del contenido energético de los compuestos químicos de una reacción, podemos estableces el siguiente criterio de espontaneidad general para reacciones a P constante:

- $\Delta G > 0 \longrightarrow$ Reacción No Espontánea
- $\Delta G < 0 \longrightarrow$ Reacción Espontánea
- $\Delta G = 0 \longrightarrow$ Condición de Equilibrio

3.12 Problemas 57

(Sol: 2 KJ)

3.12 Problemas

Problema 3.1 Al hacer una reacción a volumen constante, se desprendieron 100 kJ. Si la misma reacción se hace a presión constante se desprenden 90 kJ. Determinar para la reacción: a) ΔU b) ΔH c)Trabajo d) $\dot{\epsilon}$ El trabajo lo realiza el sistema? (Sol: a) -100 KJ; b) -90 KJ; -10 KJ)

Problema 3.2 Al calentar cloruro de amonio se obtiene $HCl_{(g)}$ y $NH_{3(g)}$. Este proceso se hizo bajo una presión constante de 1 atm, y los gases desprendidos ocuparon un volumen de 3 litros. La reacción es endotémica y su calor de la reacción en estas condiciones es de 4,05kJ. Hallar a) ΔH b) Trabajo c) ΔU .(Sol: a) 4,05 Kj; b) 0,304 KJ; b) 3,746 KJ)

Problema 3.3 En la reacción: $N_{2(g)} + 3H_{2(g)} \longrightarrow 2NH_{3(g)}$ se desprenden 41 kJ cuando reacciona 1 mol de $N_{2(g)}$ a volumen constante y a 25°C. ¿Cuál será la entalpia del proceso? (Sol: -45,95 KJ/mol)

Problemo 3.4 En la reacción: $N_{2(g)} + 3H_{2(g)} \longrightarrow 2NH_{3(g)}$ se desprenden 41 kJ cuando reacciona 1 mol de $N_{2(g)}$ a volumen constante y a 25°C. ¿Cuál será la entalpia del proceso?.(*Sol:* -45,95 KJ/mol)

Problema 3.5 A partir de:

$$B_2H_{6(g)} + 3O_{2(g)} \longrightarrow B_2O_{3(s)} + 3H_2O_{(g)} \Delta H^0 =$$

-1939 KJ $4B_{(s)} + 3O_{2(g)} \longrightarrow 2B_2O_{3(s)} \Delta H^0 =$
-1182 KJ $H_{2(g)} + 1/2O_{2(g)} \longrightarrow H_2O_{(l)} \Delta H^0 =$
-286 KJ $H_2O_{(l)} \longrightarrow H_2O_{(g)} \Delta H^0 = +41$ KJ

Calcular la entalpia de formación del dibo- Problemo 3.16

rano (B_2H_6) gas a partir de $B_{(s)}$ y $H_{2(g)}$.(Sol: 613 KJ/mol)

Problemo 3.6 Hallar ΔH^0 de la reacción $C_{(grafito)} \longrightarrow C_{(diamante)}$ si: $C_{(grafito)} + O_{2(g)} \longrightarrow CO_{2(g)} \Delta H^0 = -393 \ KJ$ $C_{(diamante)} + O_{2(g)} \longrightarrow CO_{2(g)} \Delta H^0 = -395 \ KJ$

Problema 3.7 Al formarse un mol de $HI_{(g)}$ a partir de $H_{2(g)}$ y de $I_{2(g)}$, en condiciones estándar, se desprenden 26,3 kJ. Hallar ΔH^0 para las reacciones: a) $H_{2(g)} + I_{2(g)} \longrightarrow 2HI_{(g)}$ b) $2HI_{(g)} \longrightarrow H_{2(g)} + I_{2(g)}$ (Sol: a) -52,56 KJ; b) 52,6 KJ) Problema 3.8 El $CaCO_{3(s)}$, se descompone en $CaO_{(s)}$ y $CO_{2(g)}$. Hallar a) La entalpia de la reacción, b) el volumen de butano líquido (densidad = 0,8 g/ml) que hay que quemar en un horno para conseguir el calor necesario para descomponer 100 kg de roca caliza con un contenido del 82% en CaCO₃. (En la combustión del butano se forman $CO_{2(g)}$ y vapor de agua). DATOS $\Delta H_f^0(kcal/mol): CaCO_{3(s)} = -1206,9; CaO_{(s)} = -1206,9$ 635,09; $C0_{2(g)} = -393,9$; butano(l) = -146,14; $H_2O_{(g)} = -241,82$. (Sol: a) 177,9 Kcal/mol; b) 4 l)

Problema 3.9

Problema 3.10

Problema 3.11

Problema 3.12

Problema 3.13

Problema 3.14

Problema 3.15

3.13 Citation

This statement requires citation [book_key]; this one is more specific [article_key].

3.14 Lists

Lists are useful to present information in a concise and/or ordered way¹.

3.14.1 Numbered List

- 1. The first item
- 2. The second item
- 3. The third item

¹Footnote example...

3.14.2 Bullet Points

- The first item
- The second item
- The third item

3.14.3 Descriptions and Definitions

Name Description Word Definition Comment Elaboration



4.1 Theorems

This is an example of theorems.

4.1.1 Several equations

This is a theorem consisting of several equations.

Teorema 4.1.1 — Name of the theorem. In $E = \mathbb{R}^n$ all norms are equivalent. It has the properties:

$$|||\mathbf{x}|| - ||\mathbf{y}||| \le ||\mathbf{x} - \mathbf{y}|| \tag{4.1}$$

$$\left|\left|\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_{i}\right|\right| \leq \sum_{i=1}^{n} \left|\left|\mathbf{x}_{i}\right|\right| \quad \text{where } n \text{ is a finite integer}$$

$$(4.2)$$

4.1.2 Single Line

This is a theorem consisting of just one line.

Teorema 4.1.2 A set $\mathcal{D}(G)$ in dense in $L^2(G)$, $|\cdot|_0$.

4.2 Definitions

This is an example of a definition. A definition could be mathematical or it could define a concept.

Definición 4.2.1 — **Definition name.** Given a vector space E, a norm on E is an application,

denoted $||\cdot||$, E in $\mathbb{R}^+ = [0, +\infty[$ such that:

$$|\mathbf{x}|| = 0 \Rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0} \tag{4.3}$$

$$||\mathbf{x}|| = 0 \Rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}$$

$$||\lambda \mathbf{x}|| = |\lambda| \cdot ||\mathbf{x}||$$
(4.3)

$$||\mathbf{x} + \mathbf{y}|| < ||\mathbf{x}|| + ||\mathbf{y}|| \tag{4.5}$$

4.3 Notations

Notation 4.1. Given an open subset G of \mathbb{R}^n , the set of functions φ are:

- 1. Bounded support G;
- 2. Infinitely differentiable;

a vector space is denoted by $\mathcal{D}(G)$.

Remarks

This is an example of a remark.

The concepts presented here are now in conventional employment in mathematics. Vector spaces are taken over the field $\mathbb{K} = \mathbb{R}$, however, established properties are easily extended to $\mathbb{K} = \mathbb{C}$.

Corollaries 4.5

This is an example of a corollary.

Corollary 4.5.1 — Corollary name. The concepts presented here are now in conventional employment in mathematics. Vector spaces are taken over the field $\mathbb{K} = \mathbb{R}$, however, established properties are easily extended to $\mathbb{K} = \mathbb{C}$.

Propositions 4.6

This is an example of propositions.

4.6.1 **Several equations**

Proposition 4.6.1 — Proposition name. It has the properties:

$$|||\mathbf{x}|| - ||\mathbf{y}||| \le ||\mathbf{x} - \mathbf{y}|| \tag{4.6}$$

$$\left|\left|\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_{i}\right|\right| \leq \sum_{i=1}^{n} \left|\left|\mathbf{x}_{i}\right|\right| \quad \text{where } n \text{ is a finite integer}$$

$$(4.7)$$

4.6.2 Single Line

Proposition 4.6.2 Let $f,g \in L^2(G)$; if $\forall \varphi \in \mathcal{D}(G)$, $(f,\varphi)_0 = (g,\varphi)_0$ then f = g.

4.7 **Examples**

This is an example of examples.

4.8 Exercises 61

4.7.1 Equation and Text

■ **Ejemplo 4.1** Let $G = \{x \in \mathbb{R}^2 : |x| < 3\}$ and denoted by: $x^0 = (1,1)$; consider the function:

$$f(x) = \begin{cases} e^{|x|} & \text{si } |x - x^0| \le 1/2\\ 0 & \text{si } |x - x^0| > 1/2 \end{cases}$$
 (4.8)

The function f has bounded support, we can take $A = \{x \in \mathbb{R}^2 : |x - x^0| \le 1/2 + \varepsilon\}$ for all $\varepsilon \in [0; 5/2 - \sqrt{2}[$.

4.7.2 Paragraph of Text

■ Ejemplo 4.2 — Example name.

4.8 Exercises

This is an example of an exercise.

Ejercicio 4.1 This is a good place to ask a question to test learning progress or further cement ideas into students' minds.

4.9 Problems

Problema 4.1 What is the average airspeed velocity of an unladen swallow?

4.10 Vocabulary

Define a word to improve a students' vocabulary.

Vocabulary 4.1 — Word. Definition of word.

Part Two

5 5.1 5.2	Presenting Information Table Figure	65
	Index	67



5.1 Table

Treatments	Response 1	Response 2
Treatment 1	0.0003262	0.562
Treatment 2	0.0015681	0.910
Treatment 3	0.0009271	0.296

Cuadro 5.1: Table caption

5.2 Figure

Placeholder Image

Figura 5.1: Figure caption



Citation, 13 Corollaries, 16

Definitions, 15

Examples, 16
Equation and Text, 17
Paragraph of Text, 17
Exercises, 17

Figure, 21

Lists, 13

Bullet Points, 14 Descriptions and Definitions, 14 Numbered List, 13

Notations, 16

Paragraphs of Text, 7 Problems, 17 Propositions, 16 Several Equations, 16 Single Line, 16

Remarks, 16

Table, 21 Theorems, 15 Several Equations, 15 Single Line, 15

Vocabulary, 17