

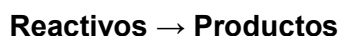
Cálculos estequiométricos

Reacciones químicas y ecuaciones

Una **reacción química** es un proceso en el cual una sustancia (o sustancias) cambia para formar una o más sustancias diferentes. Las reacciones químicas se representan utilizando **ecuaciones químicas**. En una ecuación química se utilizan fórmulas químicas para representar a las sustancias iniciales denominadas **reactivos** y a las sustancias formadas como resultado de dicha reacción denominadas **productos**. Además se utiliza una flecha entre las fórmulas de los reactivos y de los productos, que significa “produce”, y signos “+” entre las fórmulas de los reactivos y de los productos. El signo a la izquierda significa “reacciona con” y a la derecha significa “junto a”.

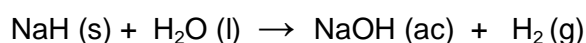
En una ecuación química se indica el estado físico de los reactivos y de los productos mediante las letras g, l, s y ac, escritas entre paréntesis, para indicar si las sustancias se encuentran en estado gaseoso, líquido, sólido y/o disueltas en solución acuosa, respectivamente.

En forma general:



De acuerdo con la ley de conservación de masa, las ecuaciones químicas tienen que estar **balanceadas**, es decir que el número de átomos de cada tipo de elemento en los reactivos y productos debe ser el mismo. En las reacciones químicas no se crean o destruyen átomos, se reordenan formando partículas diferentes.

Por ejemplo el hidruro de sodio reacciona con el agua formando hidróxido de sodio y agua. El proceso se representa por la siguiente ecuación:



A partir de la ecuación química propuesta, es posible observar que el número de átomos de cada elemento a cada lado de la flecha, coincide. En los casos en que los números de átomos no coinciden, hay que balancear la ecuación, por medio de coeficientes estequiométricos, para lo cual existen distintos métodos. Al hacerlo, es necesario tener en cuenta la siguiente clasificación:

- **Reacciones** en las que **no hay cambios** en el número de oxidación de los elementos, entre los reactivos y los productos. Las ecuaciones químicas de estas reacciones pueden igualarse por tanteo.
- **Reacciones** en las que **hay cambios** en los números de oxidación de los elementos. Este tipo de reacciones se denomina reacciones de óxido-reducción o reacciones redox. Para balancear las ecuaciones redox se utiliza el método ion-electrón.

Química

Se denomina **oxidación** al proceso por el cual un átomo de un elemento pierde electrones, aumentando su número de oxidación.

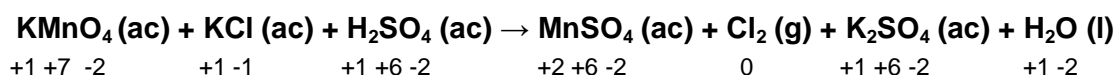
Se denomina **reducción** al proceso por el cual un átomo de un elemento gana electrones, disminuyendo su número de oxidación.

Los procesos de oxidación y reducción siempre ocurren de manera simultánea (cuando una especie se reduce, otra necesariamente se oxida).

Por lo tanto, una reacción redox implica la **transferencia de electrones** de la especie (átomo, molécula o ion) que se oxida a la especie que se reduce.

Es importante saber, que un **agente oxidante** es aquella sustancia que se reduce y produce la oxidación de otra sustancia y un **agente reductor** es aquella sustancia que se oxida y produce la reducción de otra sustancia.

Para saber si una especie se oxida o se reduce hay que tener en cuenta el número de oxidación de los todos los elementos que intervienen en la reacción, para lo cual se utilizan las reglas de asignación de los números de oxidación (unidad 2: uniones químicas). Por ejemplo, para determinar si la ecuación que se detalla a continuación representa un proceso redox, asignamos los números de oxidación de todos los elementos.



Se observa que se modifican los números de oxidación de los elementos cloro y manganeso. El **Cl⁻ del KCl se oxida a Cl₂** y el **Mn del KMnO₄ se reduce a Mn²⁺ en el MnSO₄**. Por lo tanto, es una reacción de óxido-reducción.

Cálculos estequiométricos

La **estequiometría** es una rama de la química que trata las relaciones cuantitativas entre las sustancias involucradas en las reacciones químicas.

En toda ecuación química es importante:

a) escribir las fórmulas de las sustancias de forma correcta y balancear la ecuación, en caso de que no esté balanceada.

b) interpretar el significado de la ecuación. Los coeficientes estequiométricos, a nivel submicroscópico, indican el número de partículas (iones, átomos o moléculas) de cada sustancia que intervienen en la reacción y, a nivel macroscópico, el número de moles (cantidad de sustancia) de cada una. A partir de estos datos es posible establecer relaciones cuantitativas entre distintas magnitudes de las diferentes sustancias.

Las relaciones estequiométricas que brindan las ecuaciones químicas son las que permiten realizar los cálculos correspondientes, por eso es importante interpretarlas y escribirlas.



Química

Por ejemplo calculamos la masa de oxígeno necesaria para reaccionar estequiométricamente con 10 gramos de hidrógeno y formar agua.

Ecuación balanceada	$2 \text{ H}_2 (\text{g}) + \text{O}_2 (\text{g}) \rightarrow 2 \text{ H}_2\text{O} (\text{l})$		
Relaciones estequiométricas	2 mol 4,00 g	1 mol 32,0 g	2 mol $2 \times 18,0 \text{ g} = 36,0 \text{ g}$
Datos del ejercicio e incógnita	10,0 g	¿masa?	

A partir de las relaciones estequiométricas y los datos del ejercicio es posible plantear:

Con 4,00 g de H_2 "reaccionan estequiométricamente" 32,0 g de O_2
 10,00 g de H_2 "reaccionan estequiométricamente" x= 80,0 g de O_2

En consecuencia, es posible conocer la masas o cantidad de reactivo necesaria para reaccionar con una determinada masa o cantidad de otro reactivo, como también la masa o cantidad de producto que puede obtenerse a partir de una determinada masa o cantidad de reactivo utilizando **cálculos estequiométricos**.

Para la reacción planteada es posible calcular la masa de agua que se forma a partir de 10 gramos de H_2 .

Con 4,00 g de H_2 "se forman" 36,0 g de H_2O
 10,0 g de H_2 "se forman" x= 90,0 g de H_2O

Pureza

La pureza de una muestra se expresa en porcentaje y es la masa de sustancia (pura) presente cada 100 g de muestra o mineral. Para el cálculo del porcentaje de pureza, es posible utilizar la siguiente expresión:

$$\% \text{ pureza} = \frac{\text{masa de reactivo}}{\text{masa de muestra}} \cdot 100$$

Por ejemplo, se calienta 800 g de una muestra de MgCO_3 de 92,0 % de pureza. Calcular el volumen de dióxido de carbono que se obtiene si se lo recoge a 57,0 °C y ejerce una presión de 2,00 atm. La ecuación que representa el proceso es:



**Química**

Para el cálculo estequiométrico de un producto a partir de la masa de una muestra o mineral, es necesario determinar la masa de reactivo que se encuentra en la muestra o en el mineral a partir del porcentaje de pureza, pues lo que reacciona es la masa (pura) del reactivo.

La masa de la muestra, 800 g, no son solo MgCO_3 , sino que contiene otras sustancias denominadas impurezas, motivo por el cual se determina la masa de MgCO_3 .

$$\begin{aligned} 100 \text{ g de muestra} &\text{ "contiene" } 92,0 \text{ g de } \text{MgCO}_3 \\ 800 \text{ g de muestra} &\text{ "contiene" } x = 736 \text{ g de } \text{MgCO}_3 \text{ (puro)} \end{aligned}$$

Cálculo del volumen de gas

Ecuación balanceada	$\text{MgCO}_3(\text{s}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{g}) + \text{MgO}(\text{s})$		
Relaciones estequiométricas	1 mol 84,0 g	1 mol 44,0 g	1 mol 40,0 g
Datos del ejercicio e incógnita	800 g muestra 92,0 % pureza 736 g	¿V? 57,0 °C 2,00 atm	

con 84,0 g MgCO_3 "se obtiene" 1 mol de CO_2
 736 g MgCO_3 "se obtienen" $x = 8,76$ moles de CO_2

Para determinar el volumen de gas, se utiliza la ecuación:

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

$$V = \frac{n \cdot R \cdot T}{P} = \frac{8,76 \text{ mol} \cdot 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot 330 \text{ K}}{2,00 \text{ atm}} = 118,6 \text{ dm}^3$$

Reactivo limitante



Química

El **reactivo limitante** es el reactivo que se consume primero en la reacción y que limita la cantidad de producto que se puede formar. **Recordar** que es conveniente realizar el cálculo de la cantidad de producto formado a partir del reactivo limitante.

El cálculo del reactivo limitante se realiza siempre que se informen datos (masa, cantidad, volumen de sc) de por lo menos dos de los reactivos que intervienen en la reacción.

Por ejemplo determinar el reactivo limitante si se hacen reaccionar 47,5 g de flúor con 30,0 mL de agua ($\rho = 1\text{ g/mL}$) según la siguiente ecuación:

Ecuación balanceada	$2\text{ F}_2(\text{g}) + 2\text{ H}_2\text{O}(\text{l}) \rightarrow 4\text{ HF}(\text{ac}) + \text{O}_2(\text{g})$			
Relaciones estequiométricas	2 mol 76,0 g	2 mol 36,0 g	4 mol	1 mol
Datos del ejercicio	47,5 g	30 mL ($\rho = 1\text{ g/mL}$)		

Incógnita ¿Rvo limitante?

Dado que se informan datos de los dos reactivos, hay que determinar cuál es el reactivo limitante.

Con 76,0 g de F_2 "reaccionan estequiométricamente" 36,0 g de H_2O

47,5 g de F_2 "reaccionan estequiométricamente" $x = 22,5$ g de H_2O

Conclusión, para que reaccionen los 47,5 g de F_2 se necesitan sólo 22,5 g de H_2O de los 30,0 g de los que se dispone, por lo tanto sobra agua. En este caso el agua es el reactivo en exceso, y el F_2 es el reactivo limitante.

Rendimiento

El % de **rendimiento** indica la cantidad de producto que se obtiene en la práctica en relación a la cantidad teórica que debería obtenerse según la ecuación estequiométrica. La relación estequiométrica que brinda la ecuación, la cantidad, en moles, y/o la masa de los productos corresponde a un 100 % de rendimiento, es decir, es la máxima cantidad posible de producto que se puede obtener en la reacción.

El rendimiento es un concepto que se aplica a los productos de la reacción, nunca a los reactivos.

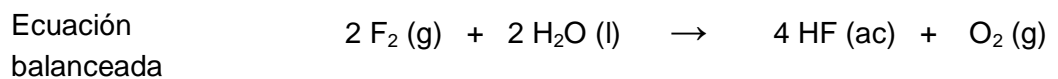
Para el cálculo del porcentaje de rendimiento, es posible utilizar la siguiente expresión:

$$\% \text{ Rto} = \frac{\text{masa o cantidad de producto obtenida}}{\text{masa o cantidad de producto esperada}} \cdot 100$$



Química

Por ejemplo, se desea conocer qué cantidad de HF se obtiene si en el ejemplo anterior la reacción se produce con un 85,0 % de rendimiento.



Relaciones estequiométricas	2 mol 76,0 g	2 mol 36,0 g	4 mol	1 mol
-----------------------------	-----------------	-----------------	-------	-------

Datos del ejercicio e incógnita	47,5 g	30 mL ($\rho = 1 \text{ g/mL}$)	Rto 85,0 %	¿cantidad?
	Rvo Limitante			

76,0 g F_2 "reaccionan formando" 4,00 mol HF

47,5 g F_2 "reaccionan formando" $x = 2,50$ mol HF (cantidad esperada, Rto al 100 %)

Dado que se informa que el rendimiento es del 85,0 %, se calcula la cantidad obtenida.

100 % Rto. ----- 2,50 mol HF

85,0 % Rto. ----- $x = 2,125$ mol HF $\rightarrow 2,13$ mol HF