

ESTEQUIOMETRÍA

Conceptos generales en Química

Dra. Lic. Victoria Calzada
Profesora Adjunta del Área Radiofarmacia
Centro de Investigaciones Nucleares
Facultad de Ciencias-UdelaR

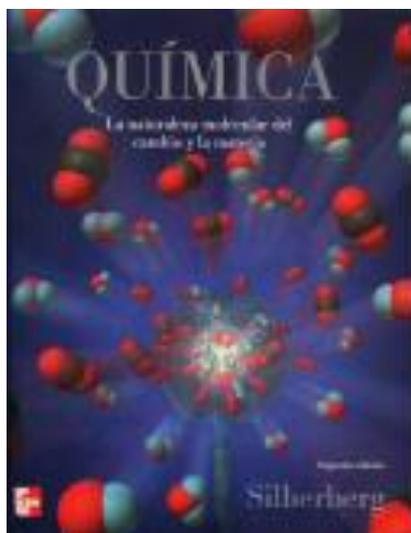


Temario

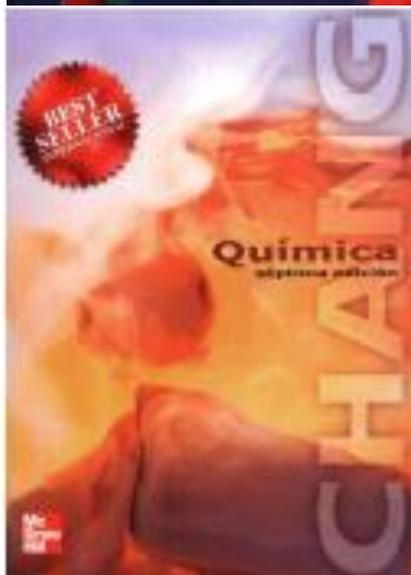
- Concepto de mol. Número de Avogadro
- Masa molar y molecular
- Fórmulas químicas-Fórmula empírica, fórmula molecular y composición porcentual
Densidad.
- Disoluciones. Distintas formas de expresar la concentración de disoluciones
- Estequiometría. Ecuaciones químicas



Bibliografía



Capítulo 3 y 4



Capítulo 3 y 4



Estequiometría

Estudia las relaciones cuantitativas entre los reactivos y productos en una reacción química

También estudia la proporción de los distintos elementos en un compuesto y la composición de mezclas.



Masa atómica

La MA es la masa de un átomo expresado en u

La Unidad de masa atómica (u, *anteriormente u.m.a.*) se define como un dodécimo (1/12) de la masa de un átomo de ^{12}C (isótopo natural más abundante del carbono)

$^1\text{H} = 1.008 \text{ u}$ (12 veces menos que ^{12}C)

Una u es equivalente a $1.66 \times 10^{-24} \text{ g}$

Pero esta es una cantidad que no podemos masar!



mol:

Es la **unidad** SIM con que se mide la **cantidad de sustancia**.

Un mol corresponde a la cantidad de sustancia que contiene tantas unidades elementales, como átomos de ^{12}C hay en 12 g de ^{12}C .



Número de Avogadro (NA):

Es el número de átomos que hay en 12g de ^{12}C

Se corresponde con **6.023×10^{23}** átomos

Se utiliza en cualquier entidad química ya se átomos, moléculas, iones.

Es decir, es la cantidad de sustancia que contiene el **NA** de átomos, moléculas, iones...

1 mol de He posee 6.023×10^{23} átomos de He

1 mol de H_2SO_4 posee 6.023×10^{23} moléculas de H_2SO_4



Un mol de cualquier sustancia es la cantidad en gramos que contiene el N_A de esa sustancia.

La masa atómica del C es de 12 u lo que significa que 1 átomo de C tiene una masa de 12 u, y como ya se ha indicado:

1 u = 1.66×10^{-24} g, por tanto:

$$\frac{12 \text{ u} \times 1.66 \times 10^{-24} \text{ g}}{1 \text{ u}} = \text{g es la masa de un átomo de C}$$

¿Cuál es la masa de 1 mol de átomos de C?

$$12 \times (1.66 \times 10^{-24} \text{ g}) / \text{átomo de C} \times 6.023 \times 10^{23} \text{ átomos/mol} = 12 \text{ g/mol}$$

$$1 \text{ u} \sim 1 \text{ g/mol}$$



Masa Molar (MM)

- La masa de las moléculas es posible calcularla con las masas atómicas (en **u o en g/mol**) de los átomos.
- Es la suma de las masas atómicas de los átomos involucrados en la fórmula de la molécula afectadas (multiplicadas) por el número de veces que aparece ese elemento en la misma.

$$\text{MM}(\text{H}_2\text{SO}_4) = 2\text{MA}(\text{H}) + \text{MA}(\text{S}) + 4\text{MA}(\text{O}) = 2(1.0 \text{ u}) + (32.0 \text{ u}) + 4(16.0 \text{ u}) = 98.0 \text{ u (g/mol)}$$

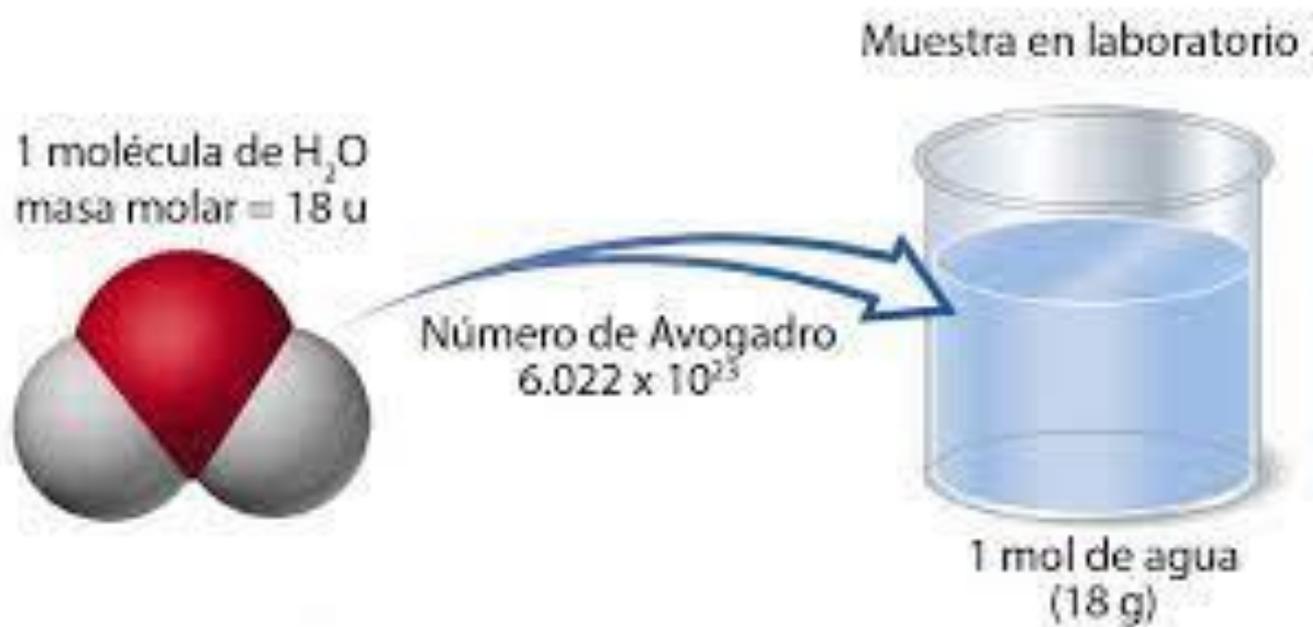
Por lo tanto 1 mol de moléculas de H_2SO_4 tiene una masa de 98 g

2 u de H → 2 g/mol de H → 2 g de átomos de H

32 u de S → 32 g/mol de S → 32 g de átomos de S

64 u de O → 64 g/mol de O → 64 g de átomos de O





Para convertir a **mol** la **masa** en gramos (m) de cualquier sustancia, sólo hay que dividir por la **masa molar** (MM) de dicha sustancia:

$$\text{mol} = m / \text{MM}$$

Ejercicio:

¿Cuántos moles hay en 24.5 g de ácido sulfúrico (H_2SO_4)?

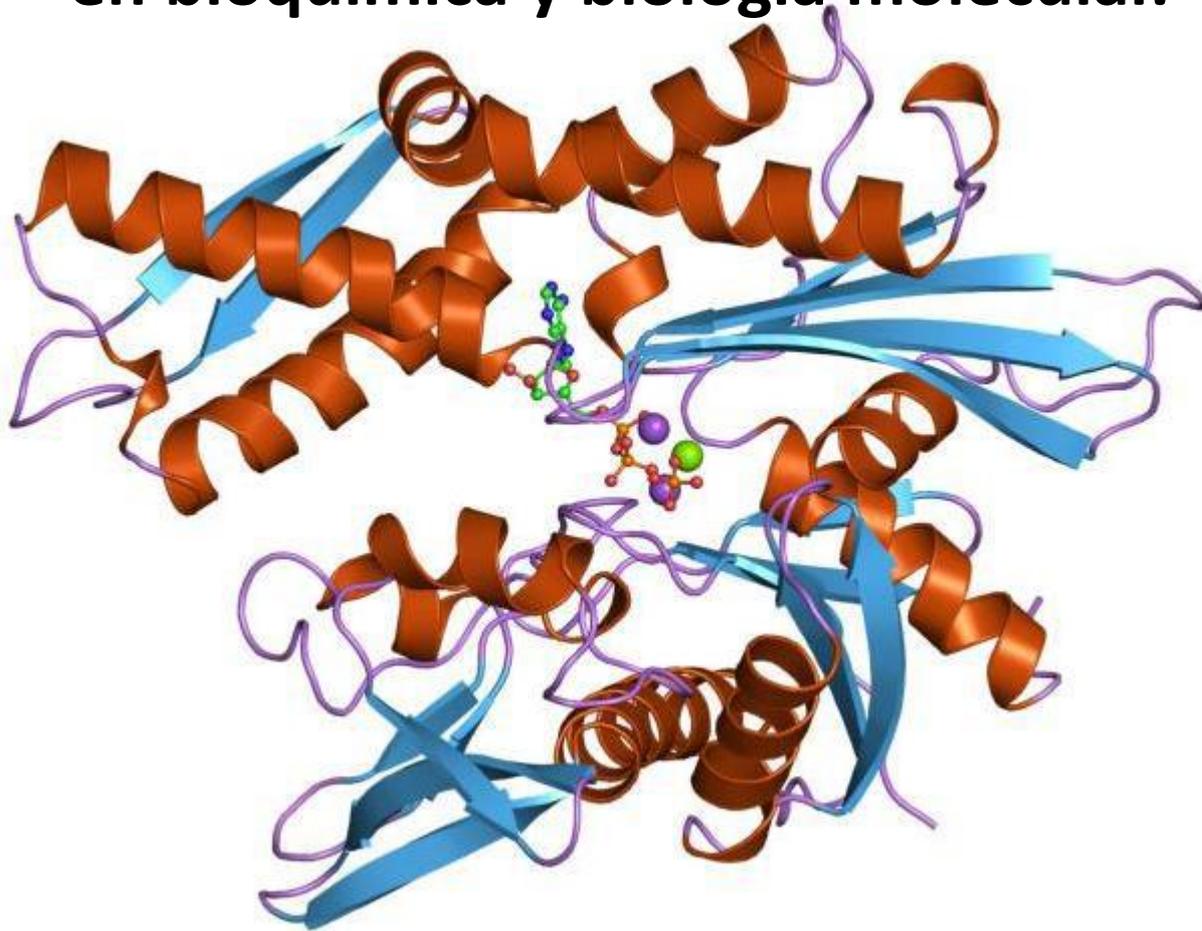
Ya sabemos que la masa molar es de 98 g/mol, por lo que:

98 g de H_2SO_4 es la masa de \rightarrow 1 mol
así que en 24.5 g de dicha sustancia habrá \rightarrow x mol

$$\frac{24.5 \text{ g de } \text{H}_2\text{SO}_4 \times 1 \text{ mol de } \text{H}_2\text{SO}_4}{98 \text{ g de } \text{H}_2\text{SO}_4} = 0.25 \text{ mol de } \text{H}_2\text{SO}_4$$



Da El **Dalton** es una unidad de masa no-SIM y es equivalente a la unidad de masa atómica. Es muy utilizado en bioquímica y biología molecular.



Hsp70, una proteína implicada en el shock térmico celular (su masa es de 70 kDa)

Fórmula química

La fórmula química es la representación de los elementos que **componen** una sustancia y la **proporción** en que se encuentran.

*¿Cómo se sabe cuáles son los elementos que **componen** la fórmula química?*

Se pueden utilizar diferentes técnicas, como por ejemplo:

- Análisis por activación neutrónica
- Espectroscopía de absorción atómica
- Análisis elemental cualitativo
- Oxidación de Schöniger
- Espectrometría de masa
- Espectroscopía electrónica Auger



¿Cómo se sabe la **proporción** de los elementos en la fórmula química?

Se pueden utilizar diferentes técnicas que permiten CUANTIFICAR los elementos, como por ejemplo:

- Análisis por activación neutrónica
- Espectroscopía de absorción atómica
- Análisis elemental cuantitativo
- Oxidación de Schöniger cuantitativa
- Técnicas gravimétricas



Composición porcentual

Para conocer la proporción en la que se encuentra un elemento en una molécula se determina el porcentaje de cada elemento sobre una base molar:



EJEMPLO: CH_2O (40.0% C, 6.71 % de H y 53.3 % de O)

$$\% \text{ en masa} = \frac{n \times MM \text{ del elemento}}{MM \text{ del compuesto}} \times 100$$



Fórmula empírica

Indica el tipo de átomos presentes en un compuesto y la relación entre el número de átomos de cada elemento.

A partir de la composición de un compuesto es posible deducir su fórmula más simple. Es una relación simple de números enteros entre los átomos que lo componen.

Para calcular la fórmula empírica de un compuesto:

1º se calcula el número de moles de cada elemento.

2º se divide por el menor número de mol.

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



Ejemplo

El ácido ascórbico (vitamina C) tiene una composición de 40.9% de C, 4.6% de H y 54.5% de O.

Para determinar la fórmula empírica de un compuesto:

- 1) se calcula el número de mol de cada elemento asumiendo 100 g de muestra
- 2) se divide cada número de mol por el menor número de mol
- 3) se hallan los subíndices como números enteros



1) Se calcula el número de mol de cada elemento asumiendo 100 g de muestra

40.9 % de C en 100 g totales son 40.9 g y sabiendo que la MA del C es 12.0 g/mol
→ $n_C = 3.4$ mol de C

4.6 % de H en 100 g totales son 4.6 g y sabiendo que la MA del H es 1.0 g/mol
→ $n_H = 4.5$ mol de H

54.5 % de O en 100 g totales son 54.5 g y sabiendo que la MA del O es 16.0 g/mol
→ $n_O = 3.4$ mol de O

2) Se divide cada número de mol por el menor número de mol

$$\text{C: } \frac{3.4}{3.4} = 1 \qquad \text{H: } \frac{4.5}{3.4} = 1.33 \qquad \text{O: } \frac{3.4}{3.4} = 1$$

3) Se hallan los subíndices como números enteros

$1.33 \times 3 = 4$ → La fórmula empírica es $\text{C}_3\text{H}_4\text{O}_3$



Fórmula molecular

Indica el tipo de átomos presentes en un compuesto, y el número de átomos de cada clase.

Para poder calcular la fórmula molecular es preciso conocer la fórmula empírica y la masa molar de la sustancia, ya que la fórmula molecular será n veces la fórmula empírica.

En general se describe la composición porcentual de masa de cada elemento. De allí se determina la fórmula empírica. Luego de conocer la masa molar del compuesto se determina la fórmula molecular.

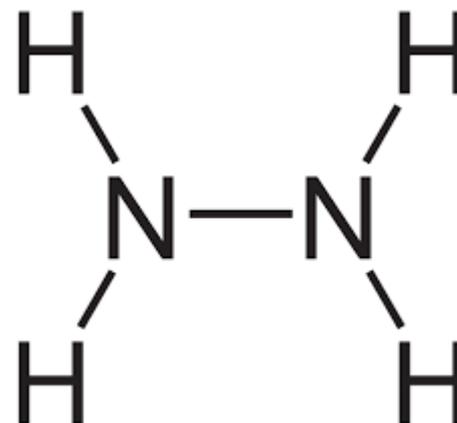


Algunos compuestos con fórmula empírica CH₂O (40% C, 6.71 % de H y 53,3 % de O)

Nombre	Fórmula molecular	Múltiplo entero	Masa Molar (g/mol)
Formaldehido	CH ₂ O	1	30.03
Ácido acético	C ₂ H ₄ O ₂	2	60.05
Ácido láctico	C ₃ H ₆ O ₃	3	90.08
Eritrosa	C ₄ H ₈ O ₄	4	120.10
Ribosa	C ₅ H ₁₀ O ₅	5	150.13
Glucosa	C ₆ H ₁₂ O ₆	6	180.16



Fórmula estructural



Muestra el número de átomos y los enlaces entre ellos.

Se determinan mediante diferentes aproximaciones:

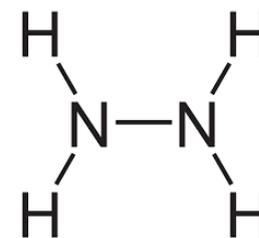
- Técnica espectroscópicas
- Análisis de Rx
- Análisis bioinformático
(para bio-macromoléculas)

Dos compuestos con formula molecular C_2H_6O

Nombre	Fórmula empírica	Fórmula molecular	Formula estructural
Etanol	C_2H_6O	C_2H_6O	
Metoximetano	C_2H_6O	C_2H_6O	



Ejemplo



Fórmula Molecular del Tetrahidruro de dinitrogeno (o *Hidracina*)=
 N_2H_4

Dividimos el número de mol de cada elemento sobre el mínimo número de mol de alguno de los elementos

$$2 \text{ átomos de N} / 2 \text{ átomos de N} = 1$$

$$4 \text{ átomos de H} / 2 \text{ átomos de N} = 2$$

La fórmula empírica = NH_2

La fórmula molecular es n veces la fórmula empírica según la masa molar del compuesto. $MM = 32 \text{ g/mol}$

$32 / MM_{\text{fórmula empírica}} = 2$, por lo que la fórmula molecular es 2 veces la fórmula empírica.

$$FM = n \times FE$$



DISOLUCIONES

Una disolución es una mezcla homogénea.

Contiene dos o más sustancias diferentes y su composición y propiedades son uniformes.

Generalmente son líquidas pero pueden existir también disoluciones gaseosas o sólidas.



Características de las disoluciones

Composición: **Soluto** y disolvente

Densidad

Concentración



ELECTROLITO

Cualquier sustancia que en disolución se disocia en sus iones y, por consiguiente, sea capaz de transportar la corriente eléctrica.

Electrolitos fuertes:

- Ácidos fuertes (HCl(ac), HI(ac), HBr(ac), HNO₃(ac), HClO₄(ac), H₂SO₄(ac))
- Bases fuertes (los hidróxidos de metales del grupo 1 y los hidróxidos de metales pesados del grupo 2 (Ca, Sr, Ba)).
- Sales (todas excepto las de Hg y Pb)

Electrolitos débiles o no electrolitos:

- Ácidos y bases débiles
- Óxidos
- Compuestos orgánicos en disolución acuosa
- Compuestos sólidos en disolución acuosa
- Gases



DENSIDAD (d)

Es la relación entre la masa y el volumen de una sustancia
 $d = m \text{ de la disolución} / \text{volumen de la disolución}$

CONCENTRACIÓN

La concentración de una disolución es la relación que hay entre la cantidad de soluto y la de disolución.

Cantidad de soluto por unidad de volumen de disolución:

1-*Molaridad (M)*

2-*Porcentaje (%)*

3-*Gramos por litro (g/L)*



Cantidad de soluto por unidad de masa de disolvente:

-*Molalidad (m), etc.*

1-MOLARIDAD (M)

Número de moles de soluto en 1 L de disolución.

$M = \text{moles de soluto} / \text{volumen de disolución en litros} = n / V(L)$

Ejemplo: se necesita preparar 100 mL de una disolución 1 M de NaOH(ac) a partir de agua y NaOH(s).

1) Necesito conocer el N° de moles de NaOH(s) que tienen que estar presentes en esos 100 mL finales de disolución.

$M \times V(L) \text{ de disolución} = \text{N}^\circ \text{ de moles de soluto} = 0.1 \text{ moles de NaOH(s)}$

2) Necesito convertir los moles de soluto en masa (g).

MM = 40 g/mol → Si en NaOH hay 40 g _____ 1 mol
entonces x _____ 0.1 mol









2- Porcentaje (%)

% (m/m) = masa de soluto (g) en 100 g de disolución

% (m/v) = masa de soluto (g) en 100 mL de disolución

% (v/v) = volumen de soluto (mL) en 100 mL de disolución

3-Gramos por litro (g/L) = gramos de soluto / litro de disolución



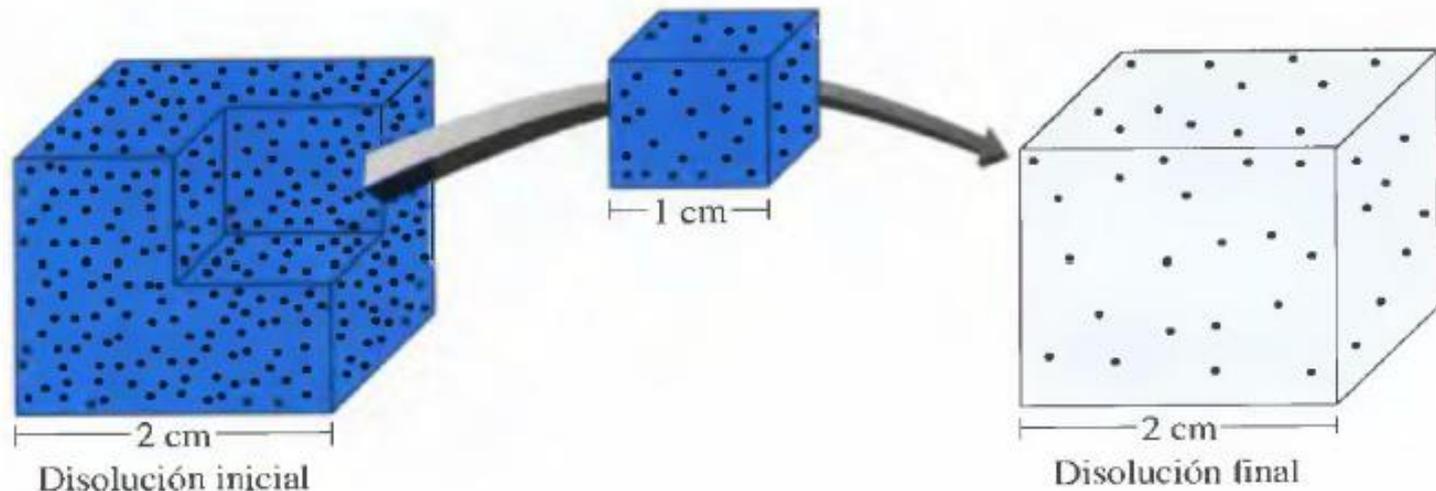
Otras formas de expresar la concentración

- Fracción Molar: es una cantidad adimensional que expresa la relación del número de moles de un componente con el número de moles de todos los componentes presentes. $x_A = \text{moles de soluto A} / \text{moles totales}$
- Partes por millón (ppm) = masa de soluto / masa total de disolución $\times 10^6 = \% \text{ masa} \times 10^4$
- Molalidad (m) = moles de soluto / masa de disolvente en kilogramos = $\text{mol} / m_{\text{disolvente}} \text{ (kg)}$



DILUCIÓN

- Consiste en reducir la concentración de una determinada disolución.
- Se basa en adicionar más disolvente a la disolución original.
- La cantidad de soluto no cambia **$M_i \times V_i = M_f \times V_f$**



DILUCIÓN

Preparamos 100 mL de una disolución 1 M de NaOH(ac) a partir de NaOH(ac) 10 M y agua.

-Determino los moles de soluto (NaOH(s)) que necesito para preparar la nueva disolución.



DILUCIÓN

Preparamos 100 mL de una disolución 1 M de NaOH(ac) a partir de NaOH(ac) 10 M y agua.

-Determino los moles de soluto (NaOH(s)) que necesito para preparar la nueva disolución.

1 M NaOH:

1 mol de NaOH ----- en 1 L de disolución

Lo que necesito:

x ----- en 0.1 L de disolución



DILUCIÓN

Preparamos 100 mL de una disolución 1 M de NaOH(ac) a partir de NaOH(ac) 10 M y agua.

1) Determino los moles de soluto (NaOH) que necesito para preparar la nueva disolución.

1 M NaOH:	1 mol de NaOH -----	en 1 L de disolución
Lo que necesito:	$x = 0.1 \text{ mol}$ -----	en 0.1 L de disolución

2) X moles van a provenir de la disolución concentrada

10M de NaOH (c) :	10 mol de NaOH -----	en 1 L de disolución
	0.1 mol de NaOH -----	x



DILUCIÓN

Preparamos 100 mL de una disolución 1 M de NaOH(ac) a partir de NaOH(ac) 10 M y agua.

1) Determino los moles de soluto (NaOH) que necesito para preparar la nueva disolución.

1 M NaOH:	1 mol de NaOH -----	en 1 L de disolución
Lo que necesito:	$x = 0.1 \text{ mol}$ -----	en 0.1 L de disolución

2) X moles van a provenir de la disolución concentrada

10M de NaOH (c) :	10 mol de NaOH -----	en 1 L de disolución
	0.1 mol de NaOH -----	$x = 0.01 \text{ L}$



DILUCIÓN

$$M_i \times V_i = M_f \times V_f$$

Preparamos 100 mL de una disolución 1 M de NaOH(ac) a partir de NaOH(ac) 10 M y agua.



DILUCIÓN

$$M_i \times V_i = M_f \times V_f$$

Preparamos 100 mL de una disolución 1 M de NaOH(ac) a partir de NaOH(ac) 10 M y agua.



DILUCIÓN

$$M_i \times V_i = M_f \times V_f$$

Preparamos 100 mL de una disolución 1 M de NaOH(ac) a partir de NaOH(ac) 10 M y agua.

$$V_i = \frac{M_f \times V_f}{M_i}$$





Extraído de: Petrucci R.

-Se toman 10 mL de NaOH(ac) 10 M con pipeta aforada y se colocan dentro del matraz volumétrico de 100 mL





Extraído de: Petrucci R., Harwood W.S. & Herring E.G. *Química*

-Se agrega una pequeña cantidad de agua y se agita para homogenizar





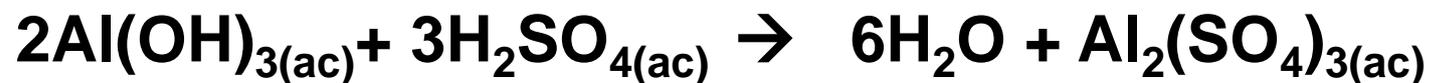
-Agregar agua hasta el aforo y agitar

Extraído de: Petrucci R., Harwood W.S. & Herring E.G. *Química General*. 8ª Ed. Prentice Hall 2002



Reacciones químicas

Una reacción química es un proceso donde se interconvierten especies químicas. Una o más sustancias llamadas **reactivos**, se transforman en una o más sustancias llamadas **productos**.



A nivel molecular, la esencia de una reacción química es la atracción de cargas y el movimiento de electrones.

La representación simbólica de las reacciones químicas son las **ecuaciones químicas** y deben contener:

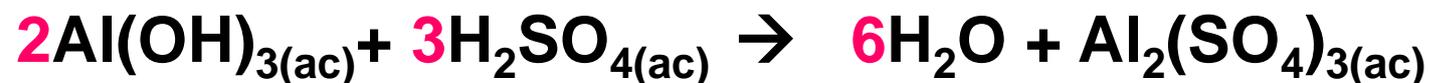
- Todos los reactivos
- Todos los productos
- El estado físico de todas las sustancias
- Las condiciones de la reacción



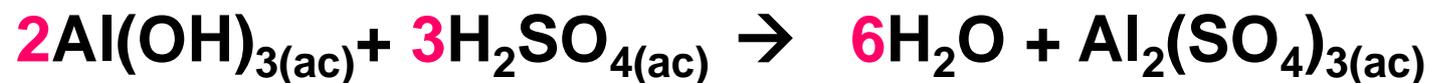
Ecuaciones químicas

Para que una ecuación química esté completa debe estar ajustada, de forma que se cumpla la ley de conservación de la masa. También debe conservarse la carga.

Para ello debe haber el mismo número de átomos de cada elemento a ambos lados de la ecuación (uso de **coeficientes estequiométricos**).



RELACIONES MOLARES

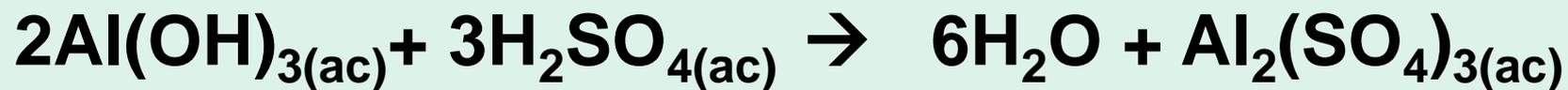


Dicho en palabras:

2 moles de $\text{Al}(\text{OH})_{3(\text{ac})}$ reaccionán con 3 moles de $\text{H}_2\text{SO}_{4(\text{ac})}$

para dar 6 moles de agua y 1 mol de $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_{3(\text{ac})}$

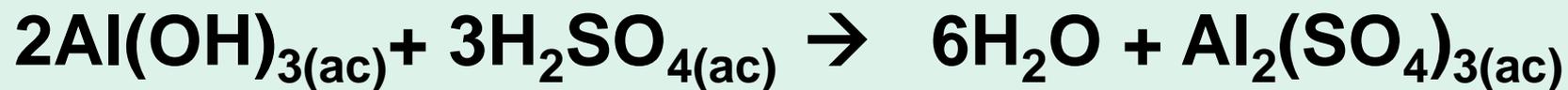




A) ¿Cuántos mol de H_2SO_4 se necesitan para producir 8 mol de $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$?

de la ecuación 3 mol de H_2SO_4 ----- 1 mol de $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$

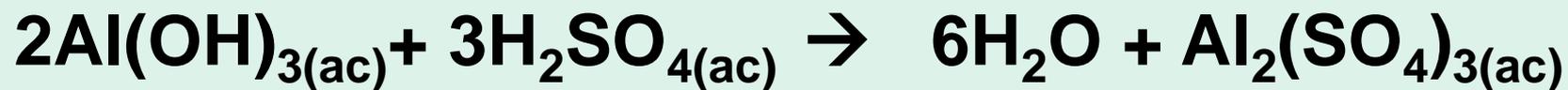




A) ¿Cuántos mol de H_2SO_4 se necesitan para producir 8 mol de $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$?

de la ecuación 3 mol de H_2SO_4 ----- 1 mol de $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$
de la letra x ----- 8 mol de $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$





B) ¿ Cuantos mol de H₂O se obtendrán a partir de 156 g de Al(OH)₃?

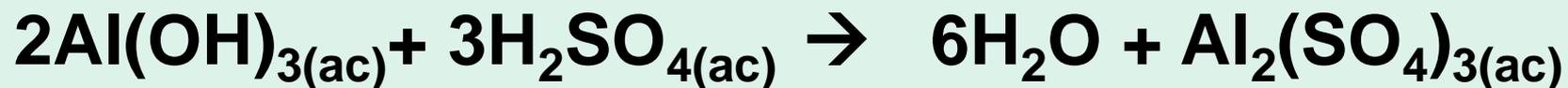
de la ecuación 2 mol de Al(OH)₃ ----- 6 mol de H₂O

de la letra 156 g de Al(OH)₃

MM= 78 g/mol → 78 g ----- 1 mol

156 g ----- x



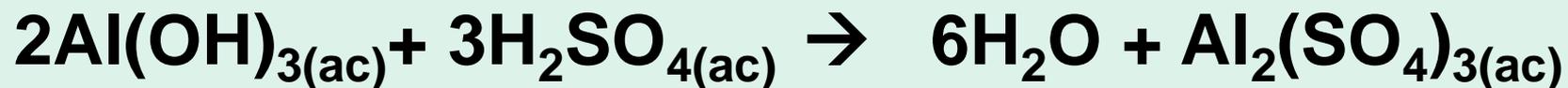


C) ¿Cuántos g de $\text{Al}(\text{OH})_3$ reaccionarán con 59 g de H_2SO_4 ?



de la letra





C) ¿Cuántos g de $\text{Al}(\text{OH})_3$ reaccionarán con 59 g de H_2SO_4 ?



de la letra



No siempre una reacción se produce de acuerdo a lo esperado.

La cantidad de producto que se suele obtener de una reacción química, es menor que la cantidad teórica deducida estequiometricamente ecuación ajustada. Esto depende de varios factores y por ello la **recuperación del 100% del producto es prácticamente imposible.**

Hay que tener en cuenta:

- Condiciones de la reacción (temperatura, productos secundarios, etc)**
- Reacciones laterales**
- Procedimientos experimentales**



Para conocer la cantidad recuperada, se debe tener en cuenta:

- Reactivo limitante**
- Pureza de los reactivos**



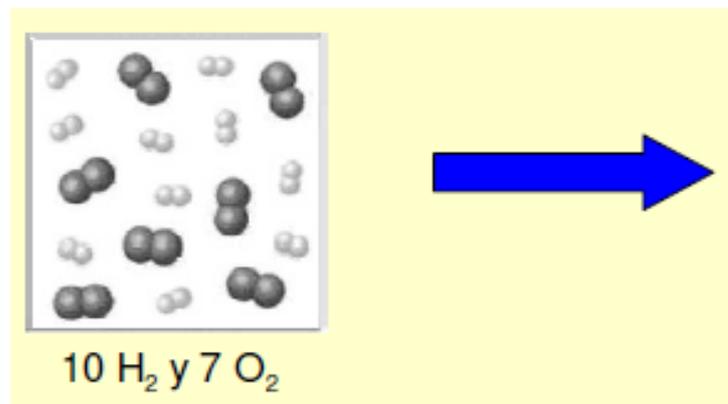
REACTIVO LIMITANTE

Al llevar a cabo una reacción química, los reactivos pueden estar o no en la proporción exacta que determinan sus coeficientes estequiométricos.

El reactivo que se consume primero en una reacción recibe el nombre de Reactivo limitante, pues la reacción solo tendrá lugar hasta que se consuma este, quedando el/los otros reactivos en exceso.



2:1



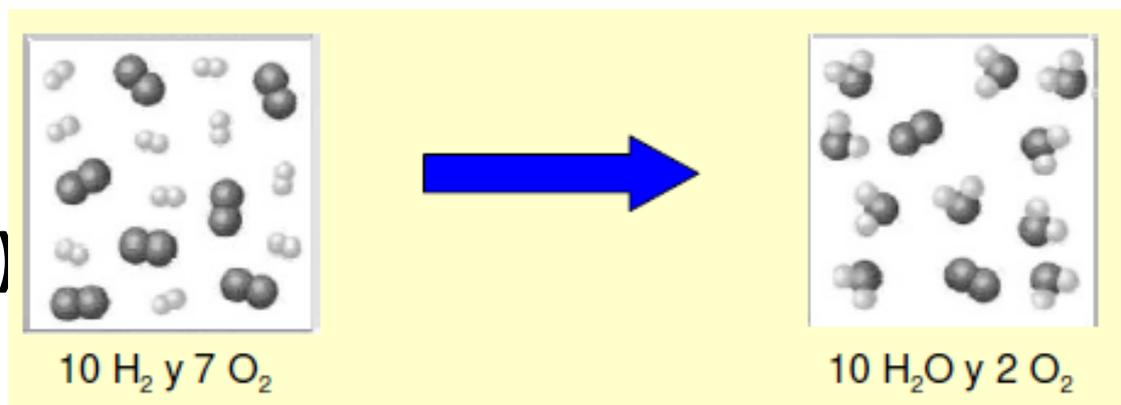
REACTIVO LIMITANTE

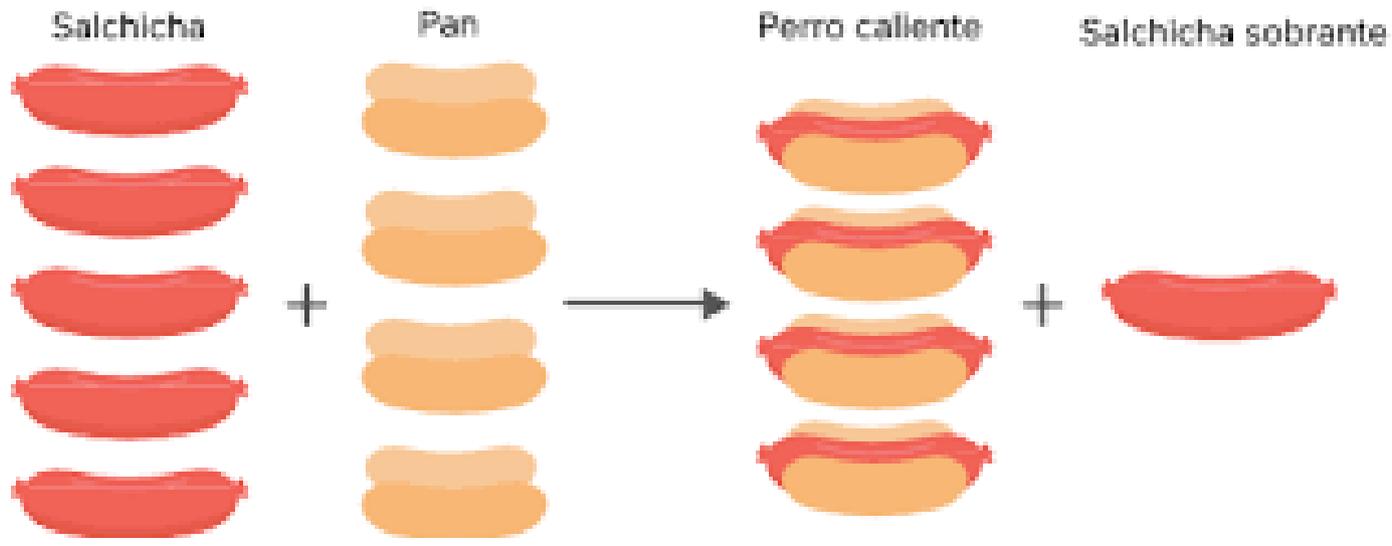
Al llevar a cabo una reacción química, los reactivos pueden estar o no en la proporción exacta que determinan sus coeficientes estequiométricos.

El reactivo que se consume primero en una reacción recibe el nombre de Reactivo limitante, pues la reacción solo tendrá lugar hasta que se consuma este, quedando el/los otros reactivos en exceso.



2:1





PUREZA

Una muestra puede no tener una pureza del 100%. Las impurezas de la misma pueden interferir en un proceso químico por lo que muchas veces es necesario determinarlas y en algunos casos eliminarlas.

Quilate de orfebrería: Designa la pureza de los metales utilizados en las joyas. Un quilate (kt) de un metal representa la venticuatroava parte (1/24) de la masa total de la aleación que la compone (aproximadamente el 4.167%). Por ejemplo, si una joya hecha con oro es de 18 quilates, su aleación está hecha de 18/24 (ó 3/4) partes de oro y tiene una pureza del 75%; mientras que una pieza de 24 quilates está hecha de 24/24 partes de oro y por lo tanto es de oro puro.



Rendimiento teórico

La cantidad máxima que puede obtenerse de un determinado producto en una reacción química se denomina Rendimiento teórico.

Es la cantidad de producto que se obtendrá si reacciona todo el reactivo limitante. Se calcula a partir de los coeficientes estequiométricos de una ecuación química y de las cantidades de reactivos empleadas.

Es improbable alcanzar el rendimiento teórico, pues las reacciones químicas no siempre se completan.



Rendimiento experimental (expresado en base al 100%)

La cantidad de producto obtenida experimentalmente (esto es, medida tras realizar el experimento en el laboratorio) es probablemente menor que la calculada teóricamente. Por ello, se define el rendimiento porcentual como el cociente entre la cantidad de producto obtenido (rendimiento experimental) y el rendimiento teórico.

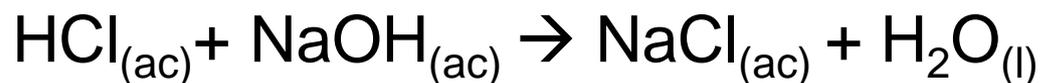
$$\frac{\text{rendimiento teórico}}{\text{rendimiento experimental}} \times 100\%$$

$$\text{Rendimiento global (\%)} = \frac{\text{rendimiento experimental}}{\text{rendimiento teórico}} \times 100$$



Ejemplo

Cuando el HCl reacciona con NaOH ocurre lo siguiente:



Cuando 3 g de hidróxido de sodio reaccionan con 0.1 mol de HCl se producen 2.6 g de NaCl. Calcular los rendimientos teórico y porcentual.

1) *Lo primero a determinar es el Reactivo limitante*

Lo que reacciona según ecuación igualada (relación de moles) es 1 mol HCl y 1 mol de NaOH para dar 1 mol de NaCl

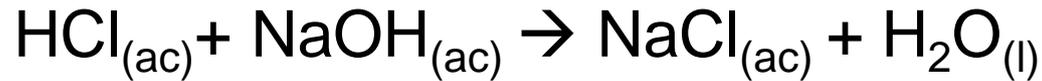
Lo que ponemos a reaccionar (letra)

0.1 mol de HCl + 0.075 mol de NaOH (los 3 g)

Deduzco que el RL es NaOH y tengo exceso de HCl



2) Luego calculo el *rendimiento teórico*



Lo que reacciona teóricamente (relación de moles de la ecuación igualada)

1 mol de NaOH para dar 1 mol de NaCl

Lo que efectivamente puede reaccionar (calculado según RL)
0.075 mol de NaOH

Deduzco que puedo obtener teóricamente 0.075 mol de NaCl =
4.38 g de NaCl

3) *Finalmente el rendimiento global es:*

rendimiento teórico (4.38 g de NaCl)	_____	100%
rendimiento experimental (letra 2.6 g de NaCl)	_____	x
		59%

