

ESTEQUIOMETRÍA

Concepto De Mol. Número De Avogadro

- ▶ La unidad empleada por los químicos para expresar el peso de los átomos es el equivalente a un número muy grande de partículas y recibe el nombre de mol. De acuerdo con el Sistema Internacional, el mol se define como la cantidad de sustancia que contiene tantas entidades (átomos, moléculas, iones) como el número de átomos existentes en 0,012 kg de carbono-12 puro.
- ▶ Numerosos experimentos han llevado a los químicos a deducir que:
- ▶ **1 mol = $6,022045 \times 10^{23}$ partículas**
- ▶ Esa cantidad, que suele redondearse a $6,022 \cdot 10^{23}$, se denomina **constante** o **número de Avogadro**, en honor al científico italiano Amedeo Avogadro.
- ▶ La unidad de mol se refiere a un número fijo de «entidades» cuya identidad se debe especificar, indicando si se refiere a un mol de átomos, de moléculas o de otras partículas

Formula Empírica y Molecular

- ▶ La fórmula molecular es la fórmula química que indica el número y tipo de átomos distintos presentes en la molécula. La fórmula molecular es la cantidad real de átomos que conforman una molécula. La fórmula molecular es la cantidad real de átomos que conforman una molécula.
- ▶ La fórmula empírica nos muestra la proporción entre los átomos de un compuesto químico. A veces puede coincidir con la fórmula molecular del compuesto. La fórmula empírica nos informa únicamente de la proporción de átomos en un compuesto.

Cálculo de la fórmula empírica

- ▶ Calcula la fórmula empírica de un hidrocarburo que en un análisis dio la siguiente composición: 85,63% de C y 14,3% de H
- ▶ Peso molecular : C = 12 g/mol
H = 1 g/mol

Dividimos los porcentajes para sus pesos moleculares

$$\text{C: } \frac{85,63 \text{ g}}{12 \text{ g/mol}} = 7,1358$$

$$\text{H: } \frac{14,3 \text{ g}}{1 \text{ g/mol}} = 14,3$$

Al menor lo reducimos a la unidad

$$\text{C: } \frac{7,1358}{7,1358} = 1$$

$$\text{H: } \frac{14,3}{7,1358} = 2$$

Por lo que la fórmula empírica sería CH₂

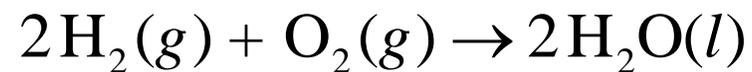
Cálculo de la fórmula molecular

- ▶ Si al ejercicio anterior le aumentamos el peso molecular 28 g/mol:
- ▶ Dividimos el peso del peso molecular para el peso de fórmula empírica
- ▶ $n = \frac{28 \text{ g/mol}}{14 \text{ g/mol}} = 2$
- ▶ Este número indica el número de veces que la fórmula empírica se repite para llegar a la fórmula molecular, entonces la fórmula molecular se calcula:
- ▶ $FM = n \cdot Fe$
- ▶ En donde FM es la fórmula molecular y Fe es la fórmula empírica
- ▶ Para el ejemplo $FM = 2 (CH_2)$
- ▶ Por lo que la fórmula molecular será: C_2H_4

Estequiometría

- ▶ Es la parte de la química que estudia las relaciones cuantitativas entre las sustancias que intervienen en una reacción química (reactivos y productos), es decir, es el estudio cuantitativo de reactivos y productos en una reacción química
- ▶ Las relaciones pueden ser: entre reactivos y productos, sólo entre reactivos o sólo entre productos.
- ▶ Cualquier cálculo estequiométrico que se lleve a cabo, debe hacerse en base a una ecuación química balanceada, para asegurar que el resultado sea correcto.

- ▶ Independientemente de que las unidades utilizadas para los reactivos (o productos) sean moles, gramos, litros (para los gases) u otras unidades, para calcular la cantidad de producto formado en una ecuación utilizamos moles. Este método se denomina método del mol, que significa que los coeficientes estequiométricos en una reacción química se pueden interpretar como el número de moles de cada sustancia. Por ejemplo en la formación del agua.



- ▶ Los coeficientes estequiométricos muestran que dos moléculas de H₂ reacciona con una molécula de O₂ para formar dos moléculas de H₂O. De aquí se desprende que los números relativos de los moles son los mismos que el número relativo de las moléculas:



2 moléculas
 $2 \times (6.022 \times 10^{23})$
moléculas)
2 mol

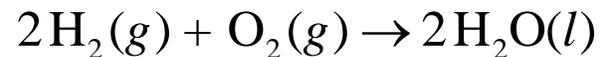
1 molécula
 6.022×10^{23} moléculas
1 mol

2 moléculas
 $2 \times (6.022 \times 10^{23})$
moléculas)
2 mol

- ▶ En calculos estequiometricos, decimos que dos moles de H₂ equivalen a dos moles de H₂O, es decir,
- ▶ 2 moles de H₂ ≈ 2 moles de NH₃
- ▶ Lo que nos permite encontrar los factores de conversión:
- ▶ $\frac{2 \text{ moles } H_2}{2 \text{ moles } H_2O}$ y $\frac{2 \text{ moles } H_2O}{2 \text{ moles } H_2}$

Aplicar el factor de conversión

- ▶ Para comprender como aplicar el factor de conversión estequiométrico, haremos un ejemplo:



- ▶ Supongamos que 8.0 moles de O_2 reaccionan completamente con H_2 para formar H_2O . Para calcular la cantidad producida de agua en moles, usamos el factor de conversión con O_2 en el denominador y escribimos:
- ▶ Moles de H_2O producidas = 8 moles $\text{O}_2 \times \frac{2 \text{ moles } \text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mol } \text{O}_2}$
- ▶ Moles de H_2O producidas = 16 moles H_2O

- ▶ Ahora suponga que 64.0 g de O_2 reaccionan completamente con H_2 para formar H_2O . ¿Cuántos gramos de H_2O se formaran? Para hacer este cálculo, debemos analizar la relación que guarda el O_2 y H_2O , es la razón molar de la ecuación balanceada. Así que primero necesitamos convertir los gramos de O_2 a moles de O_2 , después a moles de H_2O y finalmente a gramos de H_2O . Los pasos de conversión serán entonces:



- ▶ Primera conversión (con masa molecular)
- ▶ Moles de O₂ = 64 g O₂ x $\frac{1 \text{ mol O}_2}{32 \text{ g O}_2}$
- ▶ Moles de O₂ = 2 moles O₂
- ▶ Segunda conversión (Relación estequiométrica)
- ▶ *Moles de H₂O = 2 moles O₂ x $\frac{2 \text{ moles H}_2\text{O}}{1 \text{ mol O}_2}$*
- ▶ Moles de H₂O = 4 moles H₂O

- ▶ Por ultimo, calculamos la masa de H₂O producido en gramos mediante su masa molar como factor de conversión
- ▶ Gramos H₂O = 4 moles H₂O \times $\frac{18 \text{ g H}_2\text{O}}{1 \text{ mol H}_2\text{O}}$
- ▶ Gramos H₂O = 72 g H₂O

Método general para resolver problemas de estequiometría

- ▶ 1. Escriba una ecuación balanceada de la reacción.
- ▶ 2. Convierta la cantidad conocida del reactivo (en gramos u otras unidades) a número de moles.
- ▶ 3. Utilice la relación molar de la ecuación balanceada para calcular el número de moles del producto formado.
- ▶ 4. Convierta los moles de producto en gramos (u otras unidades) de producto.

Reactivo limitante

- ▶ Los coeficientes estequiométricos de la ecuación química indican las proporciones de moles de reactivos que pueden reaccionar y las proporciones molares de productos que se formarán.
- ▶ Cuando se prepara una mezcla de reactivos de modo que los moles de los mismos guardan la misma proporción que los coeficientes estequiométricos, se dice que es una mezcla estequiométrica, o que los reactivos están en proporciones estequiométricas.
- ▶ Sin embargo, normalmente se ponen a reaccionar mezclas no estequiométricas.
- ▶ En estos casos, el reactivo que está presente en menor proporción (respecto a la estequiométrica) se consume totalmente en la reacción y determina las cantidades que se consumen de los otros reactivos y las que se forman de productos, se le denomina reactivo limitante.
- ▶ Del resto de reactivos decimos que están en exceso.

Como identificar el reactivo limitante

- ▶ Analizaremos como encontrar el reactivo limitante con un ejemplo:
- ▶ Vamos a considerar la síntesis industrial del metanol (CH₃OH) a partir del monóxido de carbono e hidrógeno a altas temperaturas:



- ▶ Suponga que en un inicio se tienen 4 moles de CO y 6 moles de H₂
- ▶ Las cantidades estequiométricas deberían ser entonces 1 mol de CO y 2 de H₂, pero el ejercicio nos indica que existen 4 moles de CO y 6 de H₂.
- ▶ Vamos entonces a calcular cual de los 2 reactivos involucrados produce menos cantidad de metanol

- ▶ Si partimos con 4 moles de CO
- ▶ Moles de CH₃OH = 4 moles de CO $\times \frac{1 \text{ mol CH}_3\text{OH}}{1 \text{ mol CO}} = 4 \text{ mol CH}_3\text{OH}$
- ▶ Si partimos con 6 moles de H₂
- ▶ Moles de CH₃OH = 6 moles de H₂ $\times \frac{1 \text{ mol CH}_3\text{OH}}{2 \text{ mol H}_2} = 3 \text{ mol CH}_3\text{OH}$
- ▶ Como se puede apreciar el Hidrógeno molecular será el reactivo limitante porque forma menos cantidad de metanol

Rendimiento de la reacción

- ▶ La cantidad de reactivo limitante presente al inicio de una reacción determina el **rendimiento teórico** de la reacción, es decir, *la cantidad de producto que se obtendrá si reacciona todo el reactivo limitante*
- ▶ Sin embargo, en la práctica *la cantidad de producto que se obtiene en una reacción*, casi siempre es menor que el rendimiento teórico y es conocido como el **rendimiento real**.
- ▶ Para determinar la eficiencia de una reacción específica, se utiliza el término **porcentaje de rendimiento**, que describe *la proporción del rendimiento real con respecto al rendimiento teórico*, es decir:
- ▶ $\% \text{ de rendimiento} = \frac{\text{Rendimiento real}}{\text{Rendimiento teórico}} \times 100$

Pureza

- ▶ Las sustancias y reactivos químicos producidos por la industria química pueden contener una cierta cantidad de impurezas, tales como metales pesados, inertes y otros. Cuando se realizan cálculos estequiométricos es necesario tener en cuenta el porcentaje de pureza de estos reactivos.
- ▶ Se denomina pureza al porcentaje efectivo de reactivo puro en la masa total. Por ejemplo: 60.0 g de cobre con pureza del 80% significa que 48 g de cobre corresponden a cobre puro, siendo el resto impurezas inertes.

Ejemplo completo

- ▶ Una piedra caliza tiene una pureza en CaCO_3 del 92%. ¿Cuántos gramos de cal viva (CaO) se obtendrán por descomposición térmica de 200 g de la misma, si el rendimiento de la reacción es de 70%?



- ▶ Calculamos la masa de CaCO_3 puro que se puso a reaccionar
- ▶ 100 g de piedra ----- 92g de CaCO_3 (puro)
- ▶ 200 g de piedra -----> x = 184g de CaCO_3 (puro)
- ▶ Realizamos el cálculo estequiométrico:

CaCO₃ (s)	→	CaO (s)	+	CO₂ (g)
1 mol = 100 g		1 mol = 56 g		1 mol
184 g		? g		

$$184 \text{ g CaCO}_3 \times \frac{1 \text{ mol CaCO}_3}{100 \text{ g CaCO}_3} \times \frac{1 \text{ mol CaO}}{1 \text{ mol CaCO}_3} \times \frac{56 \text{ g CaO}}{1 \text{ mol CaO}} = 103,04 \text{ g CaO}$$

$$103,04 \text{ g CaO} \text{ ----- } -100 \text{ rendimiento}$$

$$\times \text{ ----- } -70 \text{ rendimiento}$$

$$X = 72,128 \text{ g CaO}$$