Cálculos básicos en química

- Medidas experimentales: La incertidumbre de la medida.
- Errores e incertidumbre: exactitud y precisión.
- Expresión correcta de los datos: cifras significativas.
- Operaciones.
- Factores de conversión.

Bibliografía: R. H. Petrucci, W. S. Harwood, F. G. Herring, *Química General*, 8ª edición, (Prentice Hall, Madrid, 2003).

Medidas experimentales

- La **Química** es una ciencia cuantitativa basada en la medida de las propiedades.
- Las magnitudes o propiedades se expresan indicando el valor numérico de la medida junto con la unidad. Ejemplo, la masa de un cuerpo de $m = 76{,}1$ kg.
- El Sistema de Unidades que utilizamos es el Sistema Internacional (SI).

Magnitud física fundamental	Unidad	Abreviatura
longitud	metro	m
masa	kilogramo	kg
tiempo	segundo	s
temperatura	kelvin	K
intensidad de corriente eléctrica	amperio	A
cantidad de materia	mol	mol

La incertidumbre de la medida

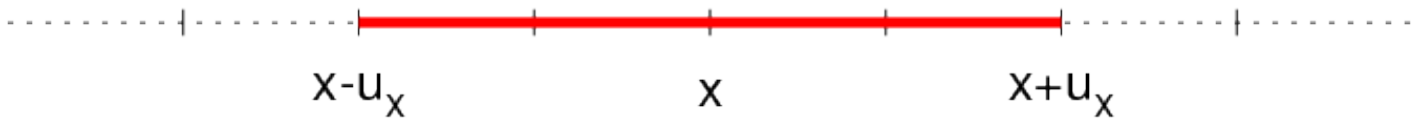
Definiciones:

Valor verdadero: Es el valor de una magnitud física objeto de medida. Es un valor desconocido por definición.

Valor medido (x): Es la expresión numérica del valor de una magnitud física obtenido como resultado de una medida experimental.

Error (de la medida): Es la diferencia entre el valor medido y el valor verdadero.

Incertidumbre (u_x): Es un valor estimado de tal forma que el intervalo determinado por $x + u_x$ y $x - u_x$, contiene con razonable certeza el valor verdadero de la medida.



Errores e incertidumbre: exactitud y precisión

Definiciones:

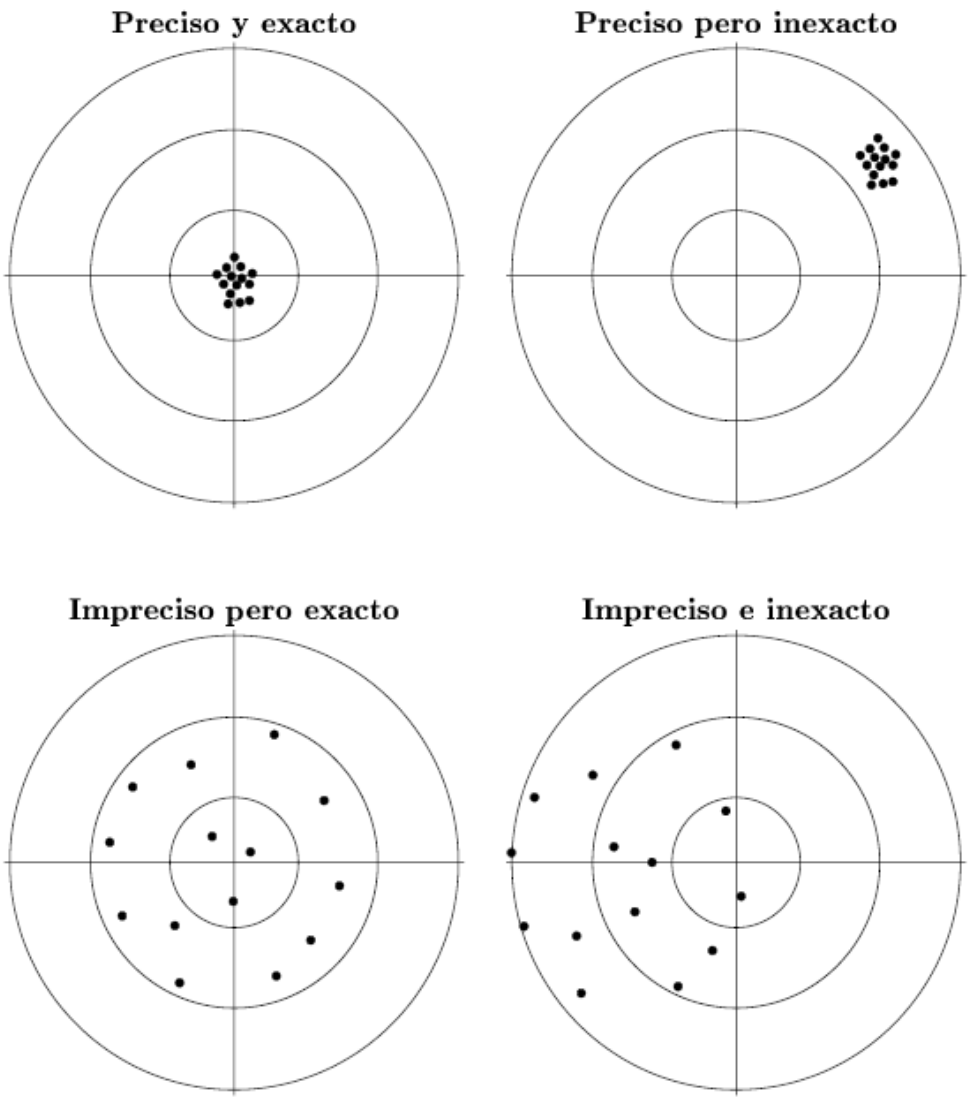
Exactitud: Grado de proximidad de la medida con respecto al valor verdadero.

- El valor verdadero no se conoce.
- En su lugar se pueden usar los valores más exactos conocidos, utilizándolos como valores de referencia.

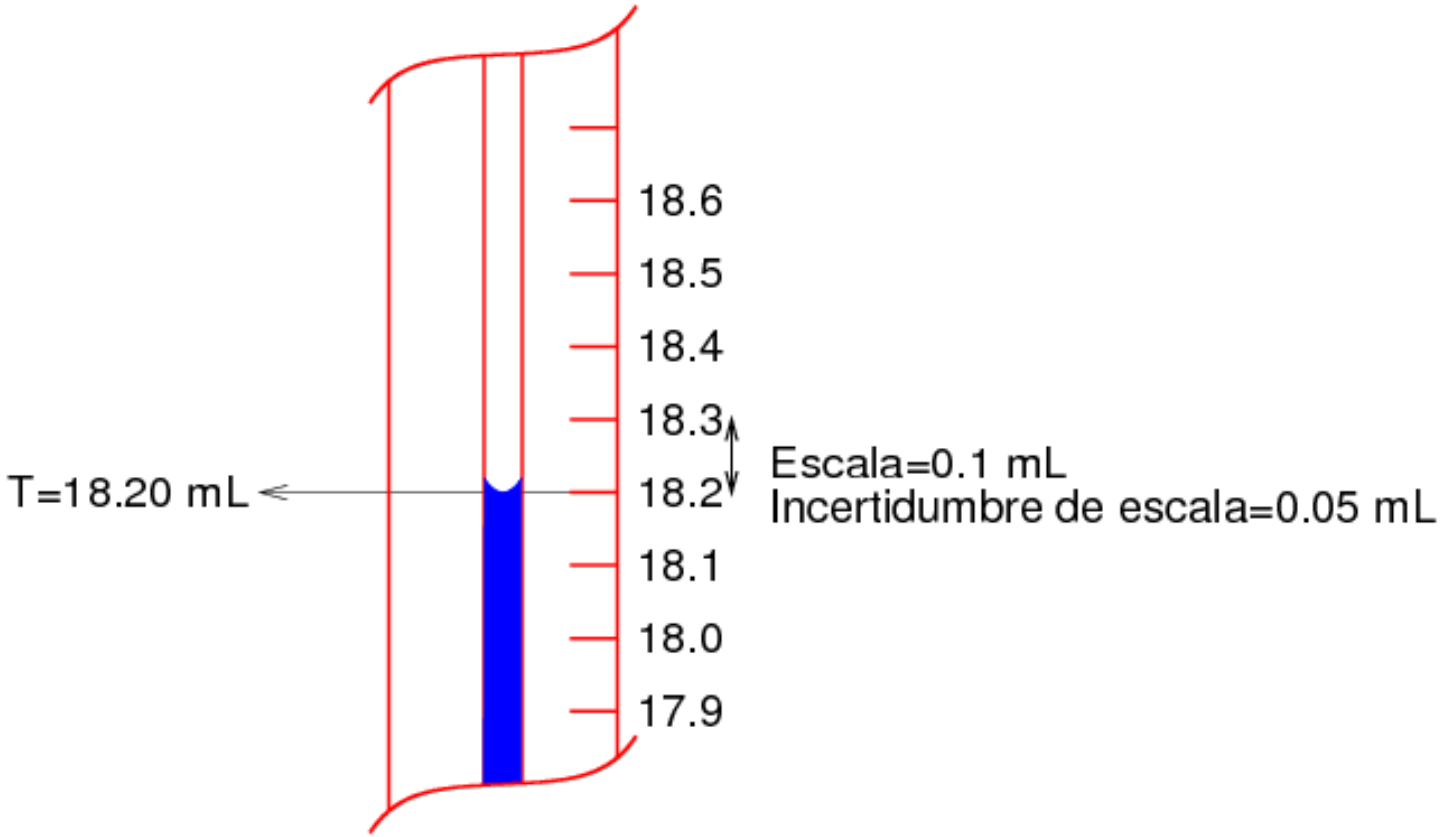
Precisión: Grado de concordancia de medidas independientes obtenidas en condiciones predeterminadas:

- Condiciones de repetitividad: Medidas realizadas con el mismo método y en condiciones experimentales *idénticas*.
- Condiciones de reproducibilidad: Medidas realizadas con el mismo método y en condiciones experimentales *diferentes*.

Errores e incertidumbre: exactitud y precisión



Expresión correcta de las magnitudes



Valor medido: $V = (18{,}20 \pm 0{,}05)$ mL

Expresión correcta de los datos: Cifras significativas

$$\text{Valor medido: } V = (18{,}20 \pm 0{,}05)\ \text{mL}$$

- Utilizar las *cifras significativas* (CS) es un modo simplificado de expresar la *incertidumbre* de la medida.
- Son significativas las cifras que conocemos con cierta seguridad. Por tanto la última CS es la que está afectada por la incertidumbre. En el ejemplo $V = 18{,}20$ mL tiene 4 CS.
- El número de CS no cambia con un cambio de unidades

$$V = 18{,}20\ \text{mL} = 0{,}01820\ \text{L} = 0{,}00001820\ \text{m}^3$$

- Los ceros a la derecha se tienen que poner si son significativos. En el ejemplo anterior es incorrecto poner: $V = 18{,}2$ mL ya que sólo tiene 3 CS.

Notación científica

$$V = 18{,}20\ \text{mL} = 0{,}01820\ \text{L} = 0{,}00001820\ \text{m}^3$$
$$V = 1{,}820 \times 10^{1}\ \text{mL} = 1{,}820 \times 10^{-2}\ \text{L} = 1{,}820 \times 10^{-5}\ \text{m}^3$$

- La notación científica es un modo conciso de representar un número utilizando potencias de base diez.
- La notación científica indica tanto el orden de magnitud como el número de cifras significativas de un número.
- Un número en notación científica se expresa mediante:
  - Mantisa o significado: Es la parte que contiene las cifras significativas. En el ejemplo:

$$V = 1{,}820 \times 10^{1}\ \text{mL}$$

  - Exponente: Indica el orden de magnitud. Es por tanto, la potencia de 10 que multiplica a la mantisa. En el ejemplo:

$$V = 1{,}820 \times 10^{1}\ \text{mL}$$

Operaciones

Problema: Queremos saber la masa del líquido medido sabiendo que la densidad del mismo es de 0,918 $\frac{g}{mL}$

Operaciones

Problema: Queremos saber la masa del líquido medido sabiendo que la densidad del mismo es de $0{,}918\ \frac{\text{g}}{\text{mL}}$

Solución: $m = V \cdot d = 18{,}20\ \cancel{\text{mL}} \cdot 0{,}918\ \frac{\text{g}}{\cancel{\text{mL}}} = 16{,}7076\ \text{g}$

Operaciones

Problema: Queremos saber la masa del líquido medido sabiendo que la densidad del mismo es de $0{,}918\ \frac{\text{g}}{\text{mL}}$

Solución:

$$m = V \cdot d = 18{,}20\ \cancel{\text{mL}} \cdot 0{,}918\ \frac{\text{g}}{\cancel{\text{mL}}} = 16{,}7076\ \text{g}$$

$$4\ \text{CS} \cdot 3\ \text{CS} \longrightarrow 3\ \text{CS}$$

Operaciones

Problema: Queremos saber la masa del líquido medido sabiendo que la densidad del mismo es de $0{,}918\ \frac{\text{g}}{\text{mL}}$

Solución: $m = V \cdot d = 18{,}20\ \cancel{\text{mL}} \cdot 0{,}918\ \frac{\text{g}}{\cancel{\text{mL}}} = 16{,}7\ \text{g}$

Operaciones

Problema: Queremos saber la masa del líquido medido sabiendo que la densidad del mismo es de 0,918 $\frac{\text{g}}{\text{mL}}$

Solución: $m = V \cdot d = 18{,}20\ \cancel{\text{mL}} \cdot 0{,}918\ \frac{\text{g}}{\cancel{\text{mL}}} = 16{,}7\ \text{g}$

- Utilizamos las CS como un método simplificado de incluir la **propagación de la incertidumbre** de las medidas en los cálculos algebraicos.
- Multiplicación y división: El resultado tiene tantas CS como el número que tiene menos CS.
- Suma y resta: El resultado tiene tantas **cifras decimales** como el número que tiene menos cifras decimales.
- Redondeo: la última cifra significativa se redondea, es decir, no cambia si la siguiente es $0, 1, 2, 3$ ó 4, y se incrementa en 1 si es $5, 6, 7, 8$ ó 9. Ej: 23,76234 con 3 CS se redonde a 23,8.

Factores de conversión

Son factores multiplicativos que se utilizan para:

- Cambiar de unidades. Ejemplo: $1\ \text{L} = 10^3\ \text{mL} \rightarrow$

$$\frac{1\ \text{L}}{10^3\ \text{mL}} \quad \text{ó} \quad \frac{10^3\ \text{mL}}{1\ \text{L}} \rightarrow V = 18{,}20\ \cancel{\text{mL}} \cdot \frac{1\ \text{L}}{10^3\ \cancel{\text{mL}}} = 1{,}820 \times 10^{-2}\ \text{L}$$

- Obtener propiedades que se relacionan proporcionalmente entre sí. Ejemplo: densidad $d = 0{,}918\ \frac{\text{g}}{\text{mL}} \rightarrow$

$$m = V \cdot d = 1{,}820 \times 10^1\ \cancel{\text{mL}} \cdot 0{,}918\ \frac{\text{g}}{\cancel{\text{mL}}} = 1{,}67 \times 10^1\ \text{g}$$