

Química

Química: Ciencia que estudia la composición, propiedades y transformación de la materia.

Materia: Materia es todo aquello que ocupa un lugar en el espacio.

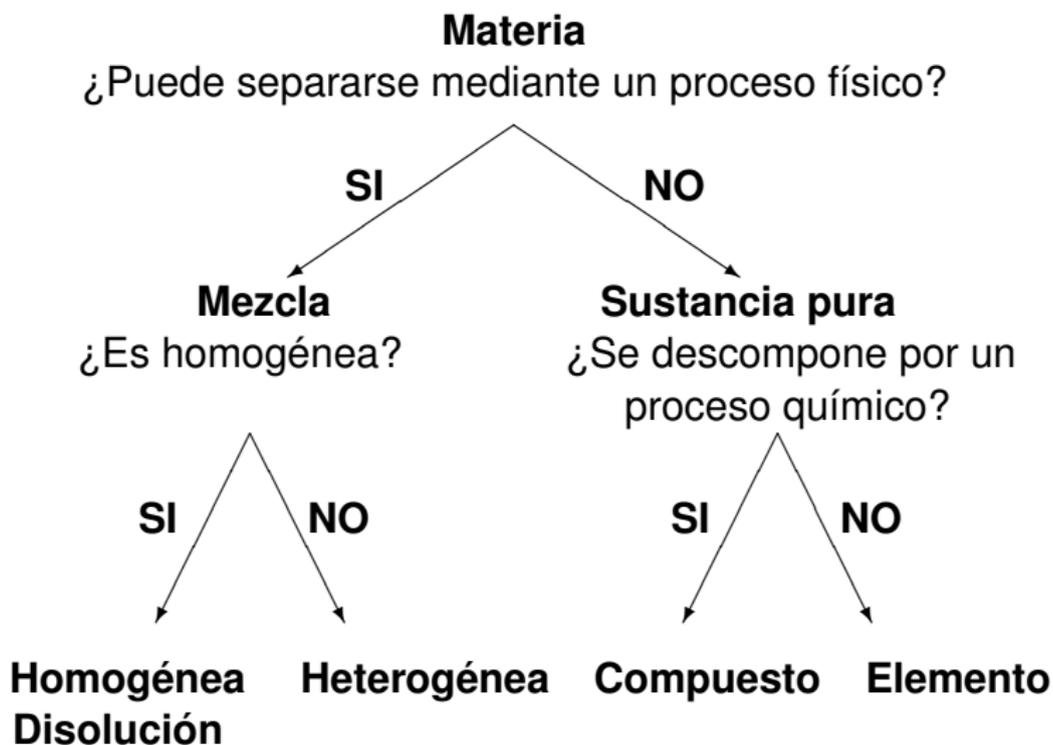
Composición: Es la proporción de partes o componentes de una muestra de materia.

Propiedades: Son las magnitudes que podemos utilizar para distinguir una muestra de materia de otra.

- **Físicas:** Son aquellas propiedades que no cambian mientras no cambie la composición ni se produzca una transformación física (cambio de estado).
- **Químicas:** Son aquellas propiedades relacionadas con las transformaciones químicas.

Transformación o reacción química: Es una transformación en la cual se modifica la naturaleza y composición de la materia.

Clasificación de la materia



Tema 1: Estequiometría

- Elementos químicos.
- Compuestos: fórmula empírica y fórmula molecular.
- Concepto de mol.
- Reacciones y ecuaciones químicas.
- Estequiometría.
- Concepto y determinación del reactivo limitante.
- Rendimiento de la reacción química.

Sistema periódico de los elementos

PERIODIC TABLE
Atomic Properties of the Elements

NIST
National Institute of Standards and Technology
Technology Administration, U.S. Department of Commerce

Frequently used fundamental physical constants
For the most accurate values of these and other constants, visit physics.nist.gov/constants
1 second = 9 192 631 770 periods of radiation corresponding to the transition between the two hyperfine levels of the ground state of the cesium-133 atom

S Solids
L Liquids
G Gases
A Artificially Prepared

Group		Period																Group	
IA																		VIIIA	
1																		18	
H																		He	
1																		2	
2																		10	
3																		8	
4																		6	
5																		4	
6																		2	
7																		0	
8																		0	
9																		0	
10																		0	
11																		0	
12																		0	
13																		0	
14																		0	
15																		0	
16																		0	
17																		0	
18																		0	
19																		0	
20																		0	
21																		0	
22																		0	
23																		0	
24																		0	
25																		0	
26																		0	
27																		0	
28																		0	
29																		0	
30																		0	
31																		0	
32																		0	
33																		0	
34																		0	
35																		0	
36																		0	
37																		0	
38																		0	
39																		0	
40																		0	
41																		0	
42																		0	
43																		0	
44																		0	
45																		0	
46																		0	
47																		0	
48																		0	
49																		0	
50																		0	
51																		0	
52																		0	
53																		0	
54																		0	
55																		0	
56																		0	
57																		0	
58																		0	
59																		0	
60																		0	
61																		0	
62																		0	
63																		0	
64																		0	
65																		0	
66																		0	
67																		0	
68																		0	
69																		0	
70																		0	
71																		0	
72																		0	
73																		0	
74																		0	
75																		0	
76																		0	
77																		0	
78																		0	
79																		0	
80																		0	
81																		0	
82																		0	
83																		0	
84																		0	
85																		0	
86																		0	
87																		0	
88																		0	
89																		0	
90																		0	
91																		0	
92																		0	
93																		0	
94																		0	
95																		0	
96																		0	
97																		0	
98																		0	
99																		0	
100																		0	
101																		0	
102																		0	
103																		0	
104																		0	
105																		0	
106																		0	
107																		0	
108																		0	
109																		0	
110																		0	
111																		0	
112																		0	
113																		0	
114																		0	
115																		0	
116																		0	
117																		0	
118																		0	
119																		0	
120																		0	

For a description of the data, visit physics.nist.gov/data NIST SP 966 (September 2003)

Compuestos: Fórmula química



- La notación moderna fue introducida por Jöns Jacob Berzelius hacia 1813.
- La fórmula química de una sustancia es una expresión compuesta de símbolos que representan los átomos y subíndices que reflejan la proporción en que aparece cada tipo de átomo en la molécula.

Fórmula empírica y molecular

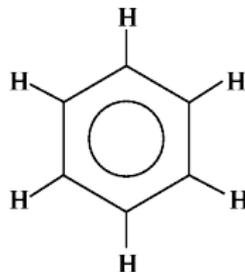
- **Fórmula empírica:** los subíndices sólo reflejan la proporción de los distintos tipos de átomos. Ej. **CH**
- La fórmula empírica **CH** puede representar distintos tipos de moléculas, p. ej:
 - C_2H_2 (acetileno o etino)
 - C_6H_6 (benceno)
 - C_8H_8 (barreleno, bicyclo[2.2.2]octa-2,5,7-trieno)
 - C_8H_8 (benzociclobuteno)
 - C_8H_8 (cubano)
- **Fórmula molecular:** los subíndices representan el número de átomos de cada tipo presentes en una molécula. Ej **C_6H_6** .

Fórmulas desarrolladas

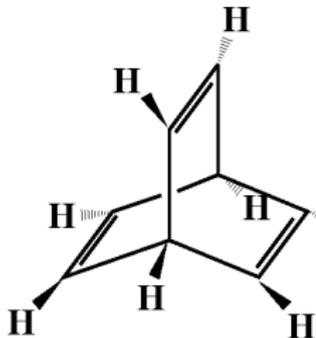
- Para eliminar ambigüedades, en ocasiones se usan fórmulas desarrolladas:



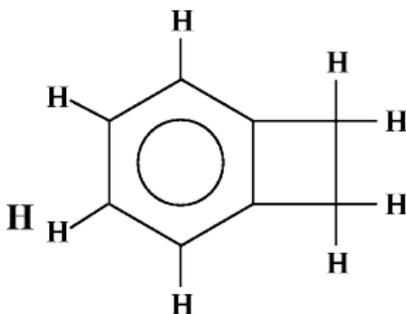
Acetileno



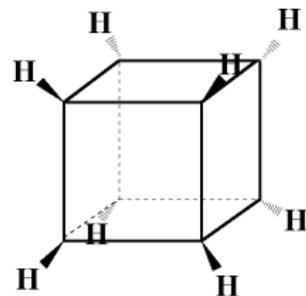
Benceno



Barreleno



Benzociclobuteno



Cubano

El concepto de mol

- Magnitud del Sistema Internacional (SI) de unidades que describe la cantidad de sustancia relacionándola con un número fijo de partículas denominado **número de Avogadro**.
- Un **mol** es una cantidad de sustancia que contiene el mismo número de partículas que el número de átomos de carbono-12 que hay en *exactamente* 12 g de carbono-12.
- El **número o constante de Avogadro** es precisamente el número de partículas (electrones, átomos, moléculas, . . .) igual al número de átomos de carbono-12 que hay en *exactamente* 12 g de carbono-12.

$$N_A = 6,02214179(30) \times 10^{23} \frac{\text{partículas}}{\text{mol}}$$

El concepto de mol

- Magnitud del Sistema Internacional (SI) de unidades que describe la cantidad de sustancia relacionándola con un número fijo de partículas denominado **número de Avogadro**.
- Un **mol** es una cantidad de sustancia que contiene el mismo número de partículas que el número de átomos de carbono-12 que hay en *exactamente* 12 g de carbono-12.
- El **número o constante de Avogadro** es precisamente el número de partículas (electrones, átomos, moléculas, ...) igual al número de átomos de carbono-12 que hay en *exactamente* 12 g de carbono-12.

$$N_A = 6,02214179(30) \times 10^{23} \text{mol}^{-1}$$

Masa molar de una molécula

- Es la masa en gramos de un mol de la molécula considerada.
- Sus unidades son $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$.
- Cuando todas las moléculas están formadas por un mismo tipo de isótopos, coincide con la masa de una molécula o **masa molecular** expresada en unidades de masa atómica.
- En el caso de átomos, se habla de masa atómica: la masa en gramos de un mol de átomos.
- Se denomina **peso atómico** al promedio de las masas de los isótopos de un elemento pesadas con su abundancia relativa en la Tierra

Peso atómico y peso molecular

- Se denomina **peso atómico** al promedio de las masas de los isótopos de un elemento pesadas con su abundancia relativa en la Tierra.
- Por ejemplo, en la Tierra las abundancias relativas de los tres isótopos del átomo de carbono son (masas atómicas en $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$):

Isótopo	Masa atómica	proporciones
^{12}C	12,0000	98,93 %
^{13}C	13,0034	1,07 %
^{14}C	14,0032	0,00 %

El peso atómico del carbono viene dado por:

$$\begin{aligned}
 P_{\text{at}}(\text{C}) &= \frac{1}{100} (12,0000 \cdot 98,93 + 13,0034 \cdot 1,07 + 14,0032 \cdot 0,00) \\
 &= 12,0107 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}
 \end{aligned}$$

La fórmula química da información sobre la composición en masa de una molécula

- Consideremos un compuesto de fórmula $A_aB_bC_cD_d$ donde A , B , C y D corresponden a distintos átomos.
- La masa molecular viene dada por:

$$\begin{aligned} \text{masa mol} &= a \cdot \text{masa at}_A + b \cdot \text{masa at}_B \\ &+ c \cdot \text{masa at}_C + d \cdot \text{masa at}_D \\ &= \sum_i n_i \cdot \text{masa at}_{l_i} \end{aligned}$$

donde $n_i = a, b, c, d$; $l_i = A, B, C, D$.

- Las proporciones en masa de cada átomo en la molécula vienen dadas por:

$$\% \text{masa}_{l_i} = \frac{n_i \cdot \text{masa at}_{l_i}}{\text{masa mol}}$$

La fórmula química da información sobre la composición en masa de una molécula: Ejemplo

- El carbonato ácido de sodio (bicarbonato sódico) tiene de fórmula: **HNaCO₃**.
- Las masas atómicas de los átomos que lo forman en $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ son: $m(\text{H})= 1,0078$, $m(\text{Na})= 22,9898$, $m(\text{C})= 12,0000$, $m(\text{O})= 15,9949$
- La masa molecular es:
 $(1,0078 + 22,9898 + 12,0000 + 3 \cdot 15,9949) \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 83,9823 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$
- Las proporciones en masa de cada elemento en la molécula son:

$$\% \text{H} = \frac{1,0078}{83,9823} \times 100 = 1,20 \% \quad \% \text{Na} = \frac{22,9898}{83,9823} \times 100 = 27,37 \%$$

$$\% \text{C} = \frac{12,0000}{83,9823} \times 100 = 14,29 \% \quad \% \text{O} = \frac{3 \cdot 15,9949}{83,9823} \times 100 = 57,14 \%$$

Reacciones químicas

- Una reacción química es un proceso en el que una o varias moléculas (**reactivos**) sufren una transformación en otras diferentes (**productos**).

reactivos \longrightarrow productos

- Los reactivos aparecen a la izquierda de la expresión y los productos a la derecha.
- Reactivos y productos aparecen separados por una flecha (simple o doble).

Reacciones químicas

- Una reacción química es un proceso en el que una o varias moléculas (**reactivos**) sufren una transformación en otras diferentes (**productos**).

reactivos \longrightarrow productos

- Los reactivos aparecen a la izquierda de la expresión y los productos a la derecha.
- Reactivos y productos aparecen separados por una flecha (simple o doble).
- Por ejemplo:



Ecuaciones químicas

- Una **ecuación química** (también llamada **estequiométrica**) es una representación simbólica de una reacción química.
- Las moléculas se representan en términos de sus fórmulas moleculares.
- Las fórmulas aparecer precedidas de números llamados **coeficientes estequiométricos**.
- Ejemplo: $2\text{H}_2\text{S} + \text{SO}_2 \rightarrow 3\text{S} + 2\text{H}_2\text{O}$



Coefficientes estequiométricos

- La finalidad de los coeficientes estequiométricos es que la ecuación química refleje dos importantes leyes de conservación que se cumplen en las reacciones: la **ley de conservación de la materia** y la **ley de la conservación de la carga**.
- Cuando un coeficiente estequiométrico es igual a uno, no se escribe explícitamente.
- Cuando una ecuación química cumple esas dos condiciones, se dice que está **ajustada**.

Ley de conservación de la materia

- Las reacciones químicas no hacen desaparecer átomos ni crean otros nuevos, por tanto:
- Todos los átomos que aparecen a la izquierda de la ecuación (reactivos) deben aparecer en las mismas cantidades a la derecha (productos).
- Ejemplo: $2\text{H}_2\text{S} + \text{SO}_2 \rightarrow 3\text{S} + 2\text{H}_2\text{O}$

Ley de la conservación de la carga

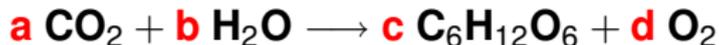
- La suma algebraica de las cargas de los reactivos (carga neta) debe ser igual a la suma algebraica de las cargas de los productos.
- Ejemplo: $2\text{Ce}^{4+} + 2\text{Cl}^{-} \rightarrow \text{Cl}_2 + 2\text{Ce}^{3+}$
- Carga neta de los reactivos: $2 \times (+4) + 2 \times (-1) = +6$.
- Carga neta de los productos: $2 \times (+3) = +6$.

¿Cómo ajustar una ecuación química?

- La forma más general (y a menudo la más simple) de ajustar una ecuación química consiste en resolver un sistema de ecuaciones lineales donde las incógnitas son los coeficientes estequiométricos.

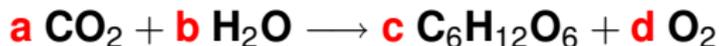
Ejemplo de ajuste de una ecuación

Vamos a ajustar la ecuación básica de la fotosíntesis. Para ello la escribimos primero con los coeficientes estequiométricos sin determinar:



Ejemplo de ajuste de una ecuación

Vamos a ajustar la ecuación básica de la fotosíntesis. Para ello la escribimos primero con los coeficientes estequiométricos sin determinar:



Aplicando la ley de conservación de la materia a cada tipo de átomo, resulta

$$\text{C} : a = 6c$$

$$\text{O} : 2a + b = 6c + 2d$$

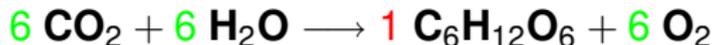
$$\text{H} : 2b = 12c$$

Ejemplo de ajuste de una ecuación

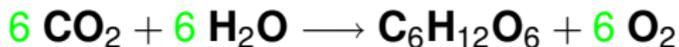
Es un sistema de ecuaciones lineales homogéneo. Para resolverlo, se fija uno de los coeficientes y se determinan los demás.

Haciendo $c = 1$, resulta: $a = 6$, $b = 6$ y $d = 6$.

La ecuación ajustada queda:



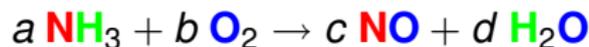
o lo que es lo mismo:





Ejemplo de ajuste de una ecuación

Veamos otro ejemplo. Sea la siguiente ecuación con los coeficientes estequiométricos sin determinar:



Aplicando la ley de conservación de la materia a cada tipo de átomo, resulta

$$\text{N} : a = c$$

$$\text{H} : 3a = 2d$$

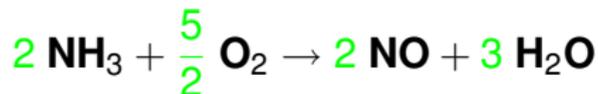
$$\text{O} : 2b = c + d$$

Es un sistema homogéneo. Para resolverlo, se fija uno de los coeficientes y se determinan los demás.

Ejemplo de ajuste de una ecuación

Haciendo $a = 2$, resulta: $c = 2$, $d = 3$ y $b = 5/2$.

La ecuación ajustada queda:



o lo que es lo mismo





La composición de un sistema

- Viene determinada por las cantidades de cada una de las sustancias que lo componen.
- Suele expresarse en términos del número de moles de cada sustancia presente en el sistema.
- En el caso de disoluciones, suele expresarse en términos de las **concentraciones** de las sustancias.

Ecuación química y composición de un sistema reactivo

- La característica de un **sistema reactivo** es que su composición varía en el tiempo.
- Cuando la composición de un sistema permanece constante en el tiempo, se dice que está en **equilibrio**.
- La composición de un sistema reactivo **cerrado** (que no pierde ni gana materia) aparece ligada por la estequiometría.
- Conociendo la composición en un instante dado y su ecuación química, para determinar la composición en otro instante cualquiera basta con determinar la cantidad de uno cualquiera de los reactivos.
- Las cantidades de los restantes pueden determinarse a partir de ella y de los coeficientes estequiométricos en términos del **grado de avance de la reacción**.

Ecuación química y composición de un sistema reactivo

- Sea una reacción de la forma:



- Las relaciones entre las variaciones de la cantidad de A y las cantidades de las restantes especies vienen dadas por

$$-\frac{\Delta n_A}{a} = -\frac{\Delta n_B}{b} = -\frac{\Delta n_C}{c} = \dots = \frac{\Delta n_D}{d} = \frac{\Delta n_E}{e}$$

con $\Delta n_i = n_i - n_i^0$, donde n_i^0 es el número de moles de la sustancia i en un instante dado (t_0).

Grado de avance de una reacción

- Las ecuaciones anteriores permiten definir el **grado de avance de la reacción** como:

$$\xi = \frac{\Delta n_A}{-a} = \frac{\Delta n_B}{-b} = \frac{\Delta n_C}{-c} = \dots = \frac{\Delta n_D}{d} = \frac{\Delta n_E}{e} = \dots$$

- o lo que es equivalente:

$$\xi = \frac{n_A - n_A^0}{-a} = \frac{n_B - n_B^0}{-b} = \frac{n_C - n_C^0}{-c} = \dots = \frac{n_D - n_D^0}{d} = \frac{n_E - n_E^0}{e} = \dots$$

- Genéricamente:
$$\xi = \frac{\Delta n_i}{\nu_i} = \frac{n_i - n_i^0}{\nu_i}$$

donde ν_i es el coeficiente estequiométrico de la especie i con signo **negativo** para los **reactivos** y **positivo** para los **productos**.

- El convenio de signos de ν_i garantiza que ξ es **positivo** si el sistema **progresa hacia los productos** y **negativo** si el sistema **retrocede hacia los reactivos**.

El grado de avance de una reacción y la composición del sistema

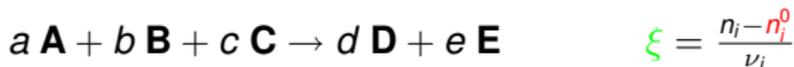
- El grado de avance de la reacción permite conocer la composición del sistema en un instante cualquiera a partir de su composición en un instante dado, t_0 .
- Sea una reacción de la forma:



- Sean n_A^0 , n_B^0 , n_C^0 , n_D^0 , n_E^0 los números de moles de las sustancias en el instante t_0 .
- De acuerdo con lo visto antes:

$$\xi = \frac{n_i - n_i^0}{\nu_i}$$

El grado de avance de una reacción y la composición del sistema



en un instante cualquiera: $n_i = n_i^0 + \nu_i \xi$



es decir: $n_A = n_A^0 - a \xi$ $n_B = n_B^0 - b \xi$ $n_C = n_C^0 - c \xi$
 $n_D = n_D^0 + d \xi$ $n_E = n_E^0 + e \xi$

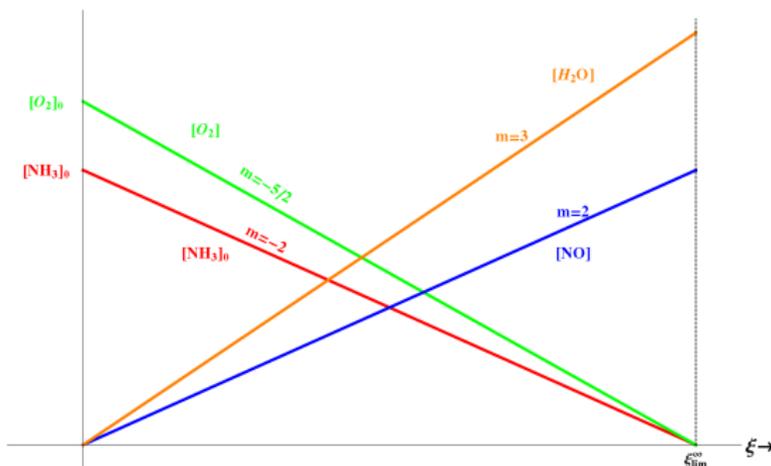
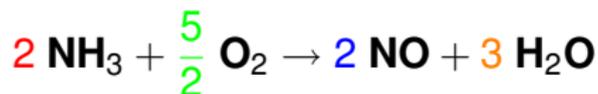
- El valor de ξ en el instante considerado de puede determinar midiendo el número de moles de alguna de las sustancias en ese instante (p. ej. n_A) y despejando de la ecuación correspondiente ($\xi = \frac{n_A - n_A^0}{-a}$).



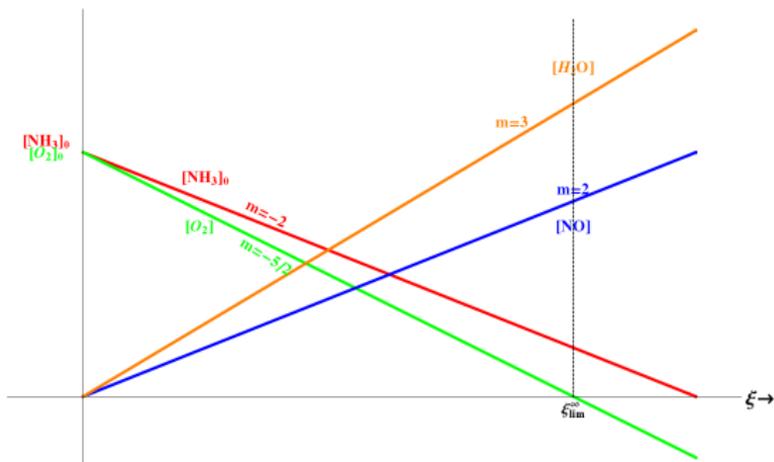
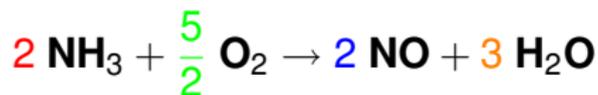
Terminación de una reacción química

- El final de una reacción química puede producirse por agotamiento de alguno o algunos de los reactivos o porque el sistema alcance una situación de equilibrio.
- Si el final se produce por agotamiento de algún reactivo, se dice que la reacción es **completa**.
- En una reacción completa, el reactivo que se agota en primer lugar recibe el nombre de **reactivo limitante**.
- El reactivo limitante viene determinado por la composición de partida del sistema y por la estequiometría de la reacción.

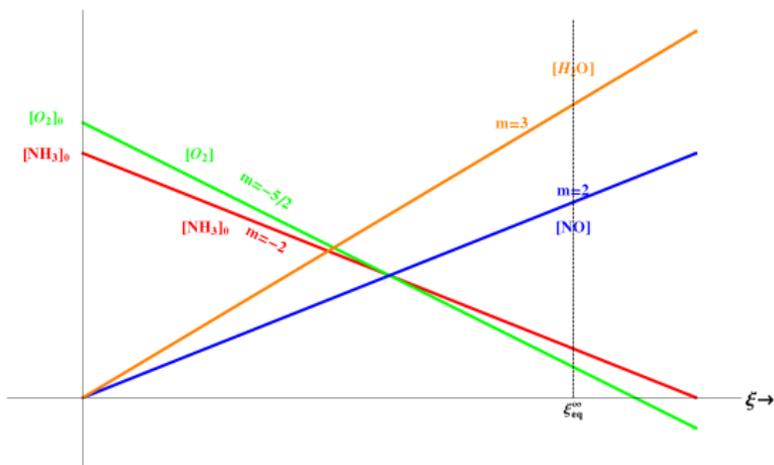
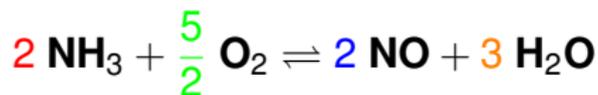
Reacciones completas en condiciones estequiométricas



Reacciones completas en condiciones no estequiométricas



Reacciones incompletas



Determinación del reactivo limitante

- Para determinar cuál es el reactivo limitante, basta con calcular $\xi_i^\infty = -n_i^0/\nu_i$ para todos los reactivos. El reactivo limitante es aquél para el que ξ_i^∞ sea menor: $\xi_i^\infty \geq \xi_{lim}^\infty \quad \forall i$.
- Demostración:

$$\xi_i^\infty \geq \xi_{lim}^\infty$$

$$\frac{-n_i^0}{\nu_i} \geq \xi_{lim}^\infty$$

$$n_i^0 \geq -\nu_i \xi_{lim}^\infty \quad \dagger$$

$$n_i = n_i^0 + \nu_i \xi_{lim}^\infty \geq 0$$

donde el signo de igualdad en la última ecuación corresponde al reactivo (o reactivos) limitante.

† Nótese que $-\nu_i > 0$ para los reactivos.

Rendimiento de una reacción

- A menudo, las reacciones terminan sin que todos los reactivos (o el limitante) se transformen en productos.
- Esto puede ocurrir bien porque la reacción no se complete (acabe en un equilibrio) o porque existan otras reacciones que compitan con la considerada.
- Se define el **rendimiento de la reacción** como:

$$\text{rend} = \frac{\xi^{\text{final}}}{\xi_{\text{lim}}^{\infty}} \times 100\%$$

Donde ξ^{final} es el grado de avance alcanzado cuando se termina la reacción.

- La cantidad de **productos** formados en función del rendimiento resulta:

$$n_i = n_i^0 + \nu_i \xi_{\text{lim}}^{\infty} \times \frac{\text{rend}}{100}$$