

UNIDAD I. ESTEQUIOMETRÍA
Tema: Cálculos estequiométricos.
(PENDIENTE 1° MEDIO)

1. Composición Centesimal

Indica el porcentaje en masa, de cada elemento que forma parte de 100 gramos de un compuesto.

Se obtiene a partir de la fórmula molecular del compuesto.

Para calcular la composición centesimal de cada elemento, se aplica la siguiente expresión:

$$\%X \left[\frac{N^{\circ} \text{ de átomos de } X \cdot \text{Masa molar de } X}{\text{Masa Molar de la Molécula}} \right] \cdot 100$$

Ejercicio.

1. Calcular el porcentaje de oxígeno, hidrógeno y nitrógeno presente en el ácido nítrico, HNO_3 . Las masas molares son: hidrógeno = 1 g/mol, nitrógeno = 14 g/mol y oxígeno = 16 g/mol

2. Fórmula empírica y molecular

La **fórmula empírica** es la fórmula mínima de un compuesto. Indica la relación más sencilla de números enteros de cada elemento presente en un compuesto.

La **fórmula molecular** es la fórmula real, ya que indica el número de átomos de cada elemento, presentes en el compuesto.

A partir de la fórmula molecular podemos obtener la fórmula empírica si dividimos todos los subíndices entre el mínimo común divisor, pero todos deben ser divisibles de lo contrario la fórmula empírica y la molecular son iguales.

EJEMPLOS

Nombre	Fórmula Molecular	Fórmula Empírica
Glucosa	$C_6H_{12}O_6$	CH_2O
Butano	C_4H_{10}	C_2H_5
Sacarosa	$C_{12}H_{22}O_{11}$	$C_{12}H_{22}O_{11}$
Acetileno	C_2H_2	CH
Benceno	C_6H_6	CH

Pasos para determinar F.E. y F.M.

PASO 1: Tomar una **base** de **100 g**, de acuerdo a la cual, 100 g de compuesto tienen tantos gramos de cada elemento como indique el porcentaje.

PASO 2: Calcular los **moles** de cada elemento.

PASO 3: Dividir los moles obtenidos en el valor más pequeño.

PASO 4: Los cocientes obtenidos, representan los subíndices de cada elemento. Estos números deben ser enteros sin redondear.

PASO 5: Calcular la masa molar de la fórmula empírica.

PASO 6: Dividir la masa molar real que proporciona el ejercicio como dato, entre la masa molar de la fórmula empírica para obtener un valor "**n**" que es el número de veces que la fórmula molecular es mayor que la empírica. Este valor "**n**" se multiplica por los subíndices de la fórmula empírica y así obtenemos la molecular.

Ejercicio.

1. Determine la fórmula empírica y molecular de un compuesto que contiene 32,4% de Na, 22,6% de S y 45,1% de O. Su masa molar es 142 g/mol.

CÁLCULOS ESTEQUIOMÉTRICOS.

Es la parte de la química que estudia las relaciones cuantitativas entre las sustancias que intervienen en una reacción química (reactivos y productos).

Estas relaciones pueden ser: **mol-mol, mol-gramos, gramos-gramos, mol-volumen, volumen-gramos y volumen-volumen.**

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.

La parte central de un problema estequiométrico es el **FACTOR MOLAR** cuya fórmula es:

$$\text{FACTOR MOLAR} = \frac{\text{MOLES DE LA SUSTANCIA DESEADA}}{\text{MOLES DE LA SUSTANCIA DE PARTIDA}}$$

Los datos para calcular el factor molar se obtienen de los **COEFICIENTES EN LA ECUACIÓN BALANCEADA**.

La **sustancia deseada** es la que se presenta como la **incógnita** y que puede ser en moles, gramos o litros; la **sustancia de partida** se presenta como **dato** y puede ser en: moles, gramos o litros.

Todo resultado estequiométrico se entregará redondeada a dos decimales.

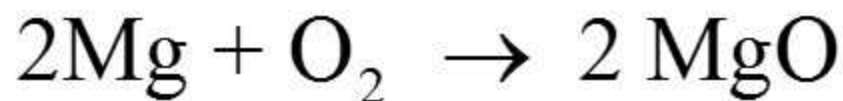
Recordando:

Para redondear con dos decimales, usamos como base el tercer decimal. Si este es mayor o igual a 5, aumentamos una unidad al segundo decimal; si es menor o igual a 4 se conservara la cifra del segundo decimal.

Número	Valor redondeado a dos decimales
15.28645	15.29
3.1247865	3.12
20.0054	20.01
155.49722	155.50

¿Cómo leer una ecuación química?

Ejemplo:



Existen tres posibilidades:

- 1) 2 átomos de Mg + 1 molécula de O_2 producen 2 moléculas de MgO
- 2) 2 moles de Mg + 1 mol de O_2 producen 2 moles de MgO
- 3) 48,6 gramos de Mg + 32,0 gramos de O_2 producen 80,6 g de MgO

Masa reactantes

=

Masa productos

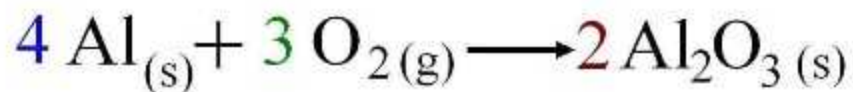
No se puede leer de esta forma:

2 gramos de Mg + 1 gramo de O_2 producen 2 g de MgO

1.1. Cálculos mol-mol.

En este tipo de relación la sustancia de partida está expresada en moles, y la sustancia deseada se pide en moles.

Ejemplo. Para la siguiente ecuación balanceada:

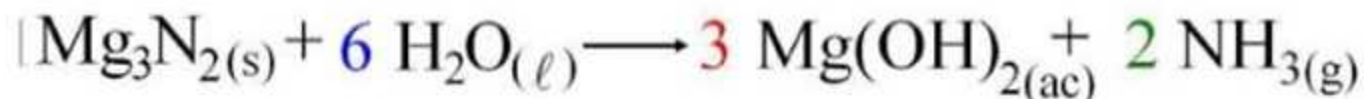


Calcule:

- ¿Cuántos mol de aluminio (Al) son necesarios para producir 5.27 mol de Al_2O_3 ?
- ¿Cuántos moles de oxígeno (O_2) reaccionan con 3.97 moles de Al?

1.2. Cálculos mol-gramo

Ejemplos. Para la ecuación mostrada



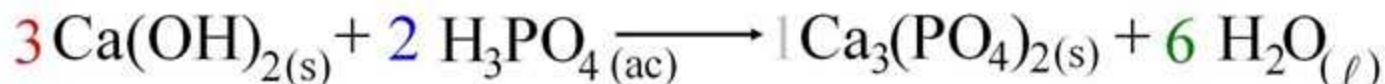
Calcule:

- Mol de $\text{Mg}(\text{OH})_2$ (hidróxido de magnesio) que se producen a partir de 125 g de agua.
- Gramos de Mg_3N_2 (nitruro de magnesio) necesarios para obtener 7.11 mol de NH_3 (amoníaco).

1.3. Cálculos gramo – gramo.

En este tipo de relación la sustancia de partida está expresada en gramos, y la sustancia deseada se pide en gramos.

Ejemplo. De acuerdo con la siguiente ecuación balanceada:



Calcule:

- ¿Cuántos gramos de H_3PO_4 (ácido fosfórico) son necesarios para producir 275 g de agua?
- ¿Cuántos gramos de $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ (fosfato de calcio) se forman cuando reaccionan 222 g de Ca(OH)_2 ?

2. Volumen molar de un gas.

El **volumen molar de un gas** es el volumen que ocupa un gas a condiciones normales (C.N.) de temperatura y presión.

Estas condiciones son:

$$T = 0^{\circ}\text{C} = 273 \text{ K}$$

$$P = 1 \text{ atm} = 760 \text{ mm de Hg} = 760 \text{ torr}$$

Este volumen es fijo y constante para estas condiciones. Como el valor es por cada mol de gas, se puede obtener la siguiente equivalencia:

$$1 \text{ MOL DE GAS} = 22.4 \text{ LITROS}$$

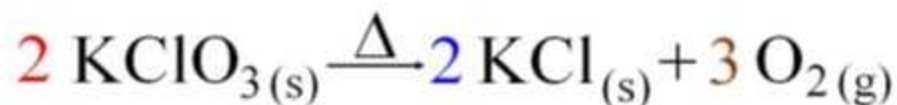
De esta equivalencia se obtienen los factores de conversión.

Para realizar un cálculo estequiométrico con volumen son necesarias dos condiciones:

1. Que las sustancias sean gases.
2. Que la reacción se efectúe en condiciones normales de temperatura y presión.

2.1. Cálculos mol-volumen.

Ejemplo: Suponiendo que la reacción se efectúa a condiciones normales de temperatura y presión:

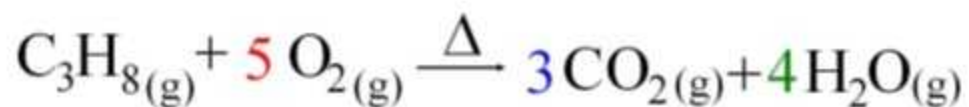


Calcule:

- a) ¿Cuántos mol de KClO_3 (clorato de potasio) son necesarios para producir 25 L de O_2 ?
- b) ¿Cuántos litros de O_2 se producen si se obtienen 5.11 moles de KCl (cloruro de potasio)?

2.2. Cálculos gramos-volumen.

Ejemplo. La siguiente ecuación balanceada, muestra la combustión del propano y se efectúa a condiciones normales de temperatura y presión.



- ¿Cuántos gramos de C_3H_8 (propano) reaccionan con 50 litros de O_2 (oxígeno)?
- ¿Cuántos litros de CO_2 (dióxido de carbono) se producen a partir de 130 g de C_3H_8 (propano)?
- ¿Cuántos gramos de agua se obtienen al producirse 319 litros de CO_2 (dióxido de carbono)?

3. Cálculos de reactivo limitante y porcentaje de rendimiento.

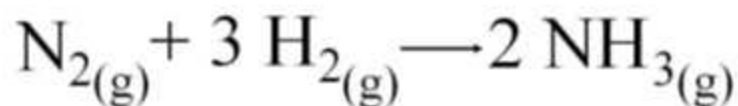
3.1. Reactivo limitante.

En una reacción química no necesariamente se consume la totalidad de los reactivos. Generalmente alguno de ellos se encuentra en exceso. El otro reactivo, que es el que se consume totalmente se conoce como **reactivo limitante**.

Para que una reacción se lleve a cabo debe haber sustancias (reactivos) capaces de reaccionar para formar los productos, pero basta que uno solo de los reactivos se agote para que la reacción termine.

En los procesos industriales generalmente se usa un exceso el reactivo mas barato y fácil de conseguir, y se selecciona como limitante el más caro o difícil de conseguir.

Ejemplo. El proceso Haber, para producción de amoníaco se representa mediante la siguiente ecuación balanceada:



- A partir de 100 g de N_2 y 100 g H_2 . ¿cuántos g de NH_3 (amoníaco) se obtienen?
- ¿Cuál el reactivo limitante y cuál el reactivo en exceso?
- Calcule la cantidad de g de reactivo en exceso que quedan al final de la reacción.

3.2. Porcentaje de rendimiento.

Cuando una reacción química se lleva a cabo, son muchos los factores que intervienen, y generalmente la cantidad de producto que se obtiene en forma real es menor que la que se calcula teóricamente. El porcentaje de rendimiento es una relación entre la producción real y la teórica expresada como porcentaje.

$$\% \text{ de rendimiento} = \frac{\text{Producción real}}{\text{Producción teórica}} (100)$$

El porcentaje de rendimiento depende de cada reacción en particular. Hay reacciones con un alto % de rendimiento y otras donde el rendimiento es relativamente pobre.