

**Tema 0. La reacción química****Grupo B. Curso 2024/25****Contenidos**

Introducción

Peso atómico y masa molar

Medidas de concentración

Disolución y dilución

Ajuste de reacciones

Estequiometría de la reacción química

Cálculos en el equilibrio

Simplificaciones: reactivo limitante

Nomenclatura química básica

Resolución de ecuaciones

**1.- Introducción**

La **Química** es la ciencia que estudia las sustancias que componen la materia, sus propiedades y los cambios que pueden experimentar. En la vida diaria nos encontramos generalmente con **materiales** que no son sustancias puras (aire, arena, agua de mar). Los materiales pueden ser *homogéneos* si tienen igual composición y propiedades en todos sus puntos (aire, agua de mar) o pueden ser *heterogéneos* y estar formados por la mezcla de partes homogéneas (arena, granito). Las **disoluciones** son mezclas homogéneas en las que el componente que facilita la disolución se denomina **disolvente** y los componentes que se disuelven **solutos**. Por ejemplo, en el agua de mar el disolvente es el agua y los solutos las sales disueltas como NaCl, KCl, etc.

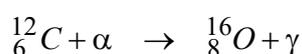
Una **sustancia** química es un tipo de materia pura formada por un solo componente de composición fija y químicamente definida. Las sustancias pueden dividirse en elementos y compuestos. Los **elementos** son sustancias que contienen una sola clase de átomos. Existen más de 100 elementos químicos cuya combinación da lugar a toda la materia que existe en la Tierra. El **átomo** es la partícula más pequeña de un elemento que sigue manteniendo las propiedades químicas del mismo y está formado por protones, neutrones y electrones.

Partícula	Símbolo	Carga	Masa/masa electrón
protón	p	+1 ( $1.602 \cdot 10^{-19}$ C)	1836.2
neutrón	n	0	1838.7
electrón	e <sup>-</sup>	-1	1 ( $9.109 \cdot 10^{-28}$ g)

Casi toda la masa y toda la carga positiva está en el núcleo, cuyo tamaño es muy pequeño ( $\cong 10^{-14}$  m) en relación con el tamaño del átomo ( $\cong 10^{-9}$  m). El número de protones de un elemento es igual al número de electrones y se conoce como **número atómico** (Z) y determina la clase de elemento y sus propiedades. El número de protones más el número de neutrones se conoce como **número másico** (A) y determina el tipo de isótopo del elemento y su peso.

Los elementos se representan por un símbolo químico formado por una o dos letras (hidrógeno H, helio He, uranio U...). Los diferentes isótopos se indican como  ${}^A_Z S$  o  ${}^A S$ , por ejemplo,  ${}^1_1\text{H}$ ,  ${}^2_1\text{H}$ ,  ${}^{20}_{10}\text{Ne}$ ,  ${}^{238}_{92}\text{U}$ ,  ${}^{235}_{92}\text{U}$ .

Todos los elementos excepto el H y parte del He, se formaron en las estrellas mediante reacciones de fusión, por ejemplo:



La mayoría de las sustancias que se conocen son compuestos. Un **compuesto** está formado por dos o más elementos distintos enlazados de acuerdo a sus propiedades químicas, lo que da lugar a que mantengan una proporción determinada. La **fórmula química** de un compuesto es una descripción de su composición e indica los elementos que lo constituyen ( $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NaCl}$ ,  $\text{CaSO}_4$ , ácido acetilsalicílico:  $\text{C}_9\text{H}_8\text{O}_4$ ). Los elementos de un compuesto pueden formar moléculas que interaccionan mediante fuerzas intermoleculares ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ), iones que se mantienen unidos mediante fuerzas electrostáticas ( $\text{Na}^+\text{Cl}^-$ ) o estructuras tridimensionales unidas por enlaces covalentes ( $\text{SiO}_2$ ).

## 2.- Peso atómico y masa molar

El peso de un átomo es muy pequeño, por ejemplo, un átomo de Carbono-12 pesa  $1.992647 \times 10^{-23}$  g, por ello, para medir las masas atómicas se utilizan unidades relativas. Por razones históricas, se establece como unidad de masa atómica (uma, u, o Dalton, Da), la doceava parte de la masa de un átomo de carbono-12 que equivale a  $1.660540 \times 10^{-24}$  g, de forma que la masa atómica relativa o peso atómico ( $A_r$ ) de un átomo de carbono-12 es de 12 u ( $12 \times 1.66054 \times 10^{-24} = 1.99265 \times 10^{-23}$  g), mientras para el Carbono-13 es 13.00335 u ( $13.00335 \times 1.66054 \times 10^{-24} = 2.15926 \times 10^{-23}$  g). Como el mol se definió en relación con el número de átomos de carbono-12 en 12 g de este isótopo, el peso en gramos de una uma es, con suficiente exactitud, igual a la inversa del número de Avogadro, (en 2018 este número se estableció con el valor exacto de  $N_A = 6.02214076 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$  y el mol como la cantidad de sustancia que contiene ese número de partículas, por lo que la relación ya no es totalmente exacta). Por ello, la masa atómica relativa de un átomo nos indica el peso, en gramos, de un mol de esos átomos con suficiente exactitud. Así un átomo de flúor (el flúor sólo tiene un isótopo estable) tiene una masa de 18.99840 u ( $18.99840 \times 1.66054 \times 10^{-24} = 3.15476 \times 10^{-23}$  g), y un mol de átomos de flúor pesa 18.9984 g ( $3.15476 \times 10^{-23} \times 6.02214076 \times 10^{23} = 18.9984 \text{ g/mol}$ ).

Se define la **masa molar** (M) como la masa de un mol de partículas y se mide en g/mol. Para los elementos con un sólo isótopo el valor de la masa molar coincide numéricamente con la masa atómica relativa ( $A_r$ ) aunque las unidades son distintas,  $A_r$  tiene unidades de masa atómica (u) y M, se mide en g/mol. En el caso de elementos con varios isótopos, las masas molares se determinan como la media ponderada, según su abundancia en la naturaleza, de las masas molares de cada isótopo. Por ejemplo, el carbono tiene dos isótopos estables, el carbono-12 representa el 98.93 % y el carbono-13 el 1.07 %, por lo tanto, la masa molar del carbono será:

$$M = 0.9893 \times 12.00000 + 0.0107 \times 13.00335 = 12.0107 \text{ g/mol}$$

La masa molar de un compuesto (o grupo de átomos con estequiometría bien establecida) es la suma de las masas molares de los elementos que lo constituyen y se calcula multiplicando la masa molar de cada elemento por el número de átomos de ese elemento en el compuesto. Por ejemplo, la masa molar del paracetamol ( $C_8H_9NO_2$ ) es:

$$M = 8 \times 12.0107 + 9 \times 1.0079 + 1 \times 14.0067 + 2 \times 15.9994 = 151.1622 \text{ g/mol}$$

Si conocemos la masa molar, podemos saber los moles de compuesto que hay en una determinada masa de sustancia pura (m):

$$n = \frac{m(\text{gramos})}{M(\text{g/mol})}$$

### 3.- Medidas de concentración

Existen diferentes formas para indicar la composición de una disolución algunas son las siguientes:

- Molaridad: 
$$C_A = \frac{\text{moles de A}}{\text{litro de disolución}} = \frac{n}{V}$$

- Molalidad: 
$$m_A = \frac{\text{moles de A}}{\text{kilogramo de disolvente}}$$

- Porcentaje en peso: 
$$A\% = \frac{\text{masa de A}}{\text{masa total}} \times 100$$

- Partes por millón: 
$$\text{ppmA} = \frac{\text{masa de A}}{\text{masa total}} \times 10^6 = \frac{\text{mg de A}}{\text{masa total (Kg)}} = \text{mg/Kg} = \mu\text{g/g} \equiv \text{mg/L} = \mu\text{g/mL}$$

- Partes por billón: 
$$\text{ppbA} = \frac{\text{masa de A}}{\text{masa total}} \times 10^9 = \frac{\mu\text{g de A}}{\text{masa total (Kg)}} = \mu\text{g/Kg} = \text{ng/g} \equiv \mu\text{g/L} = \text{ng/mL}$$

- Fracción molar: 
$$\chi_A = \frac{\text{moles de A}}{\text{moles totales}}$$

Algunas unidades, como el porcentaje, también se utilizan para expresar la composición global de mezclas heterogéneas (suelos, alimentos...). Se recomienda utilizar las unidades del Sistema Internacional, por ejemplo, mg/L (o  $\text{mg L}^{-1}$ ) en lugar de ppm. De esta forma se evitan confusiones en disoluciones donde el peso de un litro puede diferir del kilogramo.

La concentración **analítica** de una sustancia es su concentración total cualquiera que sea su estado en disolución. Así para una disolución de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0.1 M,  $C_{\text{H}_2\text{SO}_4} = 0.1$  M

La **concentración en el equilibrio** es la concentración de la especie que existe en disolución en el equilibrio. En el ejemplo anterior  $[\text{H}_2\text{SO}_4] = 0.000$  M,  $[\text{HSO}_4^-] = 0.091$  M y  $[\text{SO}_4^{2-}] = 0.009$  M

#### 4.- Disolución y dilución

El proceso de **disolución** consiste en mezclar  $n$  moles de un soluto con un volumen de disolvente para formar una fase homogénea cuya concentración molar será  $C = n/V$ . En el proceso de **dilución**, a un volumen de disolución inicial ( $V_i$ ) de concentración  $C_i$ , se le añade disolvente hasta un volumen final ( $V_f$ ), para formar una disolución final de menor concentración (diluida),  $C_f$ . Como los moles de soluto iniciales no varían pues solo se ha añadido disolvente, la concentración final puede obtenerse de la siguiente relación:

$$n_i = n_f \quad C_i V_i = C_f V_f$$

**Problema 1:** Una muestra de cenizas de 0.2472 g se disolvió con HCl 2 M y posteriormente se llevó a 50 mL (disolución A). Un volumen de 10 mL de esta disolución se trató convenientemente y se llevó a 25 mL. El análisis de esta disolución dio una concentración de  $2.72 \times 10^{-5}$  M de Fe(III). Determina la concentración de Fe(III) en la disolución A y la cantidad de Fe en la muestra en  $\mu\text{g/g}$ .

$$\text{Dilución: } C_i \times 10 = 2.72 \times 10^{-5} \times 25 \quad \rightarrow \quad C_i = 6.80 \times 10^{-5} \text{ M}$$

Esta es la concentración de la disolución inicial (disolución A) de 50 mL donde se ha disuelto toda la muestra. Los moles de Fe en esta disolución serán:

$$n_{\text{Fe}} = C \times V = 6.80 \times 10^{-5} \times 0.05 = 3.40 \times 10^{-6} \text{ moles en los 50 mL}$$

y los gramos:

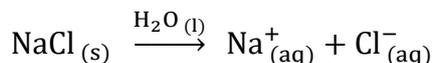
$$g_{\text{Fe}} = n_{\text{Fe}} \times M_{\text{Fe}} = 3.40 \times 10^{-6} \times 55.845 = 1.90 \times 10^{-4} \text{ gramos en los 50 mL}$$

que serán los gramos de Fe en la muestra, luego:

$$\text{ppm}_{\text{Fe}} = \frac{\mu\text{g}_{\text{Fe}}}{g_{\text{muestra}}} = \frac{1.90 \times 10^{-4} \times 10^6}{0.2472} = 769 \mu\text{g/g}$$

El proceso de disolución se debe a que la interacción entre las moléculas de disolvente y las de soluto es más fuerte que las interacciones entre las moléculas de disolvente y soluto por separado. Por ello, las sustancias no polares como las grasas no son solubles en agua al no poder sustituir los enlaces de hidrógeno entre moléculas de agua por otros enlaces agua-soluto de fuerza similar. En general se cumple la regla de que

“lo similar disuelve a lo similar”. Una de las propiedades más importantes del agua es su capacidad para disolver sustancias iónicas y polares, debido a que es una molécula dipolar y capaz de formar enlaces por puente de hidrógeno. Si el soluto es iónico, se establece una atracción entre la parte positiva del agua con los aniones y la negativa con los cationes. Este proceso se conoce como hidratación y causa la ruptura de la sal dando lugar a los respectivos iones hidratados y disueltos en medio acuoso (aq o ac):

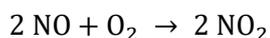


Los iones hidratados tienen un cierto número de moléculas de agua estrechamente unidas a ellos formando la capa de hidratación y alrededor ella se forma una capa con un nivel de orden decreciente hasta llegar a el agua pura.

Las sustancias que forman iones en disolución se conocen como **electrolitos** y, para un disolvente dado, un electrolito puede ser **fuerte** cuando su disociación es completa (NaCl y HCl en agua) o **débil** cuando la disociación es parcial (HF en agua). Los electrolitos también pueden clasificarse como **verdaderos**, cuando en estado puro están formados por iones (NaCl, MgSO<sub>4</sub>), o **potenciales**, cuando en estado puro están formados por moléculas que forman iones en el proceso de disolución (HCl y HF).

## 5. La reacción química. Ajuste de reacciones.

Una reacción química es el proceso que da lugar a una transformación química en la cual un conjunto de sustancias llamadas reactivos reaccionan (se transforman) para formar un conjunto de sustancias llamadas productos. Por ejemplo:



En esta reacción el monóxido de nitrógeno (NO) reacciona con el oxígeno (O<sub>2</sub>) para dar dióxido de nitrógeno (NO<sub>2</sub>). La reacción está ajustada y en cada lado hay el mismo número de átomos de cada elemento (dos de nitrógeno y 4 de oxígeno). El número entero que acompaña a cada sustancia en la reacción ajustada se denomina **coeficiente estequiométrico**. Los coeficientes estequiométricos definen la reacción y son necesarios para los cálculos estequiométricos o relaciones entre las cantidades de reactivos que reaccionan y las de productos que se forman en la reacción.

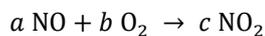
Para ajustar una reacción química hay que hallar los coeficientes estequiométricos que ajustan ambos lados de la reacción. En el ajuste por tanteo se prueban coeficientes hasta obtener los adecuados. Algunos consejos son:

- Ajustar como una unidad los grupos de elementos que no cambian en la reacción (por ejemplo, el sulfato o nitrato si está como tal tanto en los reactivos como en los productos).
- Si un elemento está solo en un compuesto en cada lado de la reacción, ajustar este elemento en primer lugar (por ejemplo, el nitrógeno en la reacción anterior).
- Si un elemento aparece como elemento libre en la reacción ajustarlo en último lugar (por ejemplo, el oxígeno en el caso anterior).
- Se pueden utilizar números enteros o fracciones.

De forma general puede aplicarse un procedimiento puramente matemático si consideramos la igualdad del número de átomos entre reactivos y productos, como se ve en el problema 2.

**Problema 2:** Ajustar la reacción:  $\text{NO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{NO}_2$

Si la reacción ajustada es:



El balance de átomos para cada elemento será:

$$a = c$$

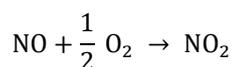
$$a + 2b = 2c$$

Siempre tendremos una situación en la que habrá más incógnitas que ecuaciones pues existen infinitas soluciones que son múltiplos entre sí. Para reducir el problema al conjunto de números enteros más pequeños daremos el valor de 1 a uno los coeficientes. En este caso si tomamos  $a=1$ , tendremos:

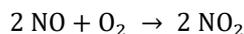
$$a = c = 1$$

$$a + 2b = 2c \quad 2b = 1 \quad b = \frac{1}{2}$$

Y la ecuación ajustada será:

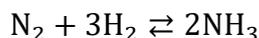


Que podemos multiplicar por 2 para obtener números enteros:



## 6. Estequiometría de la reacción química

La estequiometría de la reacción química se basa en la aplicación del principio de conservación de la materia e indica que, para un elemento, los moles permanecen constantes, independientemente de su forma química. Este principio se aplica mediante el **balance de materia** que establece la conservación de los moles de los elementos que intervienen en la reacción. Consideremos la reacción de formación del amoníaco:



Pueden plantearse dos balances de masas, uno para el nitrógeno y otro para el hidrógeno:

$$2n_{\text{N}_2}^0 + n_{\text{NH}_3}^0 = 2n_{\text{N}_2} + n_{\text{NH}_3}$$

$$2n_{\text{H}_2}^0 + 3n_{\text{NH}_3}^0 = 2n_{\text{H}_2} + 3n_{\text{NH}_3}$$

Estos balances indican que la materia se conserva y los moles iniciales de N y H son iguales a los moles finales. A partir de los balances de masa, agrupando cada especie:

$$-2n_{\text{N}_2} + 2n_{\text{N}_2}^0 = n_{\text{NH}_3} - n_{\text{NH}_3}^0$$

$$-2n_{\text{H}_2} + 2n_{\text{H}_2}^0 = 3n_{\text{NH}_3} - 3n_{\text{NH}_3}^0$$

Si dividimos la primera ecuación entre  $3 \times 2$  y la segunda entre  $1 \times 2$ :

$$\frac{n_{\text{N}_2} - n_{\text{N}_2}^0}{-1} = \frac{n_{\text{NH}_3} - n_{\text{NH}_3}^0}{2}$$

$$\frac{n_{\text{H}_2} - n_{\text{H}_2}^0}{-3} = \frac{n_{\text{NH}_3} - n_{\text{NH}_3}^0}{2}$$

Esta magnitud se conoce como grado de avance de la reacción:

$$\xi = \frac{n_{\text{N}_2} - n_{\text{N}_2}^0}{-1} = \frac{n_{\text{H}_2} - n_{\text{H}_2}^0}{-3} = \frac{n_{\text{NH}_3} - n_{\text{NH}_3}^0}{+2}$$

El grado de avance es una consecuencia de la conservación de la materia y se define como:

$$\xi = \frac{n_A - n_A^0}{\nu_A}$$

donde  $n_A^0$  son los moles iniciales de A,  $n_A$  los moles de A cuando la reacción ha tenido lugar en un grado de avance  $\xi$  y  $\nu_A$  el coeficiente estequiométrico de la especie en la reacción con signo positivo para los productos y negativo para los reactivos. El grado de avance describe el progreso de la reacción cuantificando el número de transformaciones molares que han tenido lugar. Es independiente de la especie que se utilice para calcularlo, por lo que permite relacionar las distintas especies y realizar cálculos estequiométricos de forma sencilla. Además, es positivo si la reacción se desplaza hacia la derecha y negativo si la reacción se desplaza de los productos hacia los reactivos.

Es interesante destacar que el grado de avance permite relacionar los moles que han intervenido en la reacción de todos los compuestos:

$$\frac{\Delta n_{\text{N}_2}}{1} = \frac{\Delta n_{\text{H}_2}}{3} = \frac{\Delta n_{\text{NH}_3}}{2}$$

donde los moles que han reaccionado o se han producido de cada especie (con signo positivo) se dividen por su coeficiente estequiométrico (también con signo positivo). Así, las cantidades de moles que cumplen la relación anterior se dicen que están en **proporción estequiométrica**. Esta definición será muy útil para obtener el reactivo limitante como veremos más adelante.

Para la reacción de formación del amoníaco, el grado de avance en unidades molares será:

$$\xi = \frac{n_{\text{H}_2} - n_{\text{H}_2}^0}{-3} = \frac{n_{\text{N}_2} - n_{\text{N}_2}^0}{-1} = \frac{n_{\text{NH}_3} - n_{\text{NH}_3}^0}{+2}$$

A partir de los balances de masa, agrupando cada especie, podemos establecer las relaciones:

$$2n_{\text{H}_2}^0 - 2n_{\text{H}_2} = 3n_{\text{NH}_3} - 3n_{\text{NH}_3}^0$$

$$2n_{\text{N}_2}^0 - 2n_{\text{N}_2} = n_{\text{NH}_3} - n_{\text{NH}_3}^0$$

Si dividimos la primera ecuación entre  $3 \times 2$  y la segunda entre  $1 \times 2$ , tendremos el grado de avance y la relación entre los compuestos que intervienen en la reacción:

$$\frac{n_{\text{H}_2} - n_{\text{H}_2}^0}{-3} = \frac{n_{\text{NH}_3} - n_{\text{NH}_3}^0}{2} = \xi$$

$$\frac{n_{\text{N}_2} - n_{\text{N}_2}^0}{-1} = \frac{n_{\text{NH}_3} - n_{\text{NH}_3}^0}{2} = \xi$$

Por lo tanto, el grado de avance es una consecuencia del principio de conservación de la materia. Es interesante destacar que el grado de avance permite relacionar los moles de todos los compuestos que han intervenido en la reacción:

$$\frac{\Delta n_{\text{H}_2}}{3} = \frac{\Delta n_{\text{N}_2}}{1} = \frac{\Delta n_{\text{NH}_3}}{2}$$

donde los moles que han reaccionado o se han producido de cada especie (con signo positivo) se dividen por su coeficiente estequiométrico (también con signo positivo). Así, las cantidades de moles que cumplen la relación anterior se dicen que están en **proporción estequiométrica**. Esta definición será muy útil para obtener el reactivo limitante como veremos más adelante.

A partir del grado de avance puede plantearse un balance de grado de avance de la reacción para cada especie:

$$n_A = n_A^0 + \nu_A \xi$$

Por ejemplo para la reacción de formación del amoníaco:

$$n_{\text{N}_2} = n_{\text{N}_2}^0 - \xi$$

$$n_{\text{H}_2} = n_{\text{H}_2}^0 - 3\xi$$

$$n_{\text{NH}_3} = n_{\text{NH}_3}^0 + 2\xi$$

Para simplificar los llamaremos **balances de reacción** pues indican como afecta la reacción a los balances de materia, en moles, de cada especie.

**Problema 3:** Se introducen en un recipiente de 5 litros 0.2 moles de  $\text{H}_2$ , 0.1 moles de  $\text{N}_2$  y 0.01 moles de  $\text{NH}_3$  a 500 K. Al cabo de un tiempo en el recipiente se comprueba que hay 0.043 moles de amoníaco ¿Cuál ha sido el grado de avance de la reacción y los moles de  $\text{H}_2$  y  $\text{N}_2$  que quedarán?

$$\xi = \frac{n_{\text{NH}_3} - n_{\text{NH}_3}^0}{+2} = \frac{0.043 - 0.01}{2} = 0.0165 \text{ moles}$$

y de los balances de reacción:

$$n_{\text{H}_2} = n_{\text{H}_2}^0 - 3\xi = 0.2 - 3 \times 0.0165 = 0.1505 \text{ moles}$$

$$n_{\text{N}_2} = n_{\text{N}_2}^0 - \xi = 0.1 - 0.0165 = 0.0835 \text{ moles}$$

Cuando el volumen no varía puede plantearse el grado de avance en unidades de concentración:

$$x = \frac{\xi}{V} = \frac{n_A/V - n_A^0/V}{\nu_A}$$

Finalmente:

$$x = \frac{[A] - C_A}{\nu_A}$$

donde  $[A]$  es la concentración en el equilibrio o en cualquier momento de la reacción definido por el grado de avance  $x$  y  $C_A$  es la concentración inicial cuando  $x=0$ .

A partir del grado de avance se pueden obtener balances en concentraciones:

$$[A] = C_A + \nu_A x$$

Para la reacción de formación del amoníaco:

$$[N_2] = C_{N_2} - x$$

$$[H_2] = C_{H_2} - 3x$$

$$[NH_3] = C_{NH_3} + 2x$$

El procedimiento de la Tabla ICE (Inicio, Cambio, Equilibrio) utilizado en Química General para estudiar las concentraciones en el equilibrio aplica implícitamente estos balances.

Si se producen varias reacciones, cada una de ellas tendrá un grado de avance y los balances de reacción se obtendrán sumando las contribuciones de cada reacción. Por ejemplo:



Los balances de grado de avance serán:

$$[\text{NO}] = C_{\text{NO}} - 2x_1$$

$$[\text{O}_2] = C_{\text{O}_2} - x_1$$

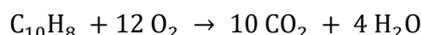
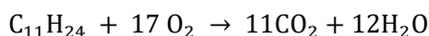
$$[\text{NO}_2] = C_{\text{NO}_2} + 2x_1 - 2x_2$$

$$[\text{N}_2\text{O}_4] = C_{\text{N}_2\text{O}_4} + x_2$$

donde  $x_1$  es el grado de avance de la reacción (1) y  $x_2$  el de la reacción (2).

**Problema 4:** El diésel es una mezcla hidrocarburos alifáticos y aromáticos de densidad 0.85 g/mL, supongamos un diésel compuesto solo por un 75% en peso de undecano ( $C_{11}H_{24}$ ) y un 25% de naftaleno ( $C_{10}H_8$ ). Ajusta las reacciones de combustión de ambos hidrocarburos teniendo en cuenta que los productos son  $CO_2$  y  $H_2O$ . ¿Cuántos gramos de cada producto se obtendrán y cuanto oxígeno se consumirá en la combustión completa de 5 litros de diésel necesarios para recorrer 100 Km?

Las reacciones de combustión son:



Evaluaremos los gramos de ambos combustibles:

$$m_{\text{diésel}} = V \times \rho = 5000 \text{ mL} \times 0.85 \frac{\text{g}}{\text{mL}} = 4250 \text{ g}$$

$$m_{C_{11}H_{24}} = m_{\text{diésel}} \times \frac{\%}{100} = 4250 \times 0.75 = 3185.7 \text{ g } C_{11}H_{24}$$

$$m_{C_{10}H_8} = 4250 \times 0.25 = 1062.5 \text{ g } C_{10}H_8$$

Y los moles:

$$n_{\text{C}_{11}\text{H}_{24}} = \frac{3185.7}{156.31} = 20.38 \text{ moles} \quad n_{\text{C}_{10}\text{H}_8} = \frac{1062.5}{127.17} = 8.35 \text{ moles}$$

Los balances de reacción serán, considerando que todos los reactivos se consumen:

$$n_{\text{C}_{11}\text{H}_{24}} = 20.38 - \xi_1 = 0 \quad \xi_1 = 20.38$$

$$n_{\text{C}_{10}\text{H}_8} = 8.35 - \xi_2 = 0 \quad \xi_2 = 8.35$$

$$n_{\text{O}_2} = n_{\text{O}_2}^0 - 17 \xi_1 - 12 \xi_2 = 0 \quad n_{\text{O}_2}^0 = 17 \times 20.38 + 12 \times 8.35 = 446.66 \text{ moles}$$

$$n_{\text{CO}_2} = 11 \xi_1 + 10 \xi_2 = 11 \times 20.38 + 10 \times 8.35 = 307.68 \text{ moles}$$

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = 12 \xi_1 + 4 \xi_2 = 12 \times 20.38 + 4 \times 8.35 = 277.96 \text{ moles}$$

Y la masa:

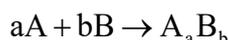
$$m_{\text{O}_2}^0 = 446.66 \times 32.00 = 14293 \text{ g} = 14.3 \text{ Kg de O}_2 \text{ consumidos}$$

$$m_{\text{CO}_2} = 307.68 \times 44.01 = 13541 \text{ g} = 13.5 \text{ Kg de CO}_2 \text{ generados}$$

$$m_{\text{H}_2\text{O}} = 277.96 \times 18.02 = 5009 \text{ g} = 5.0 \text{ Kg de H}_2\text{O generados}$$

### Estequiometría de los compuestos químicos.

Si consideramos la reacción de formación de un compuesto químico a partir de sus elementos en proporciones estequiométricas:



Cuando todos los elementos han reaccionado para formar el compuesto, al estar en proporciones estequiométricas los moles finales serán cero por lo que el grado de avance será:

$$\xi = n_{\text{A}_a\text{B}_b} = \frac{n_{\text{A}}}{a} = \frac{n_{\text{B}}}{b}$$

o bien:

$$n_{\text{A}} = a \times n_{\text{A}_a\text{B}_b}$$

$$n_{\text{B}} = b \times n_{\text{A}_a\text{B}_b}$$

donde  $n_{\text{A}}$  y  $n_{\text{B}}$  son los moles de A y B que forman  $n_{\text{A}_a\text{B}_b}$  moles del compuesto.

**Problema 5:** Indica cuantos gramos de  $\text{P}_2\text{O}_5$  podrían obtenerse de 0.2389 g de  $\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}$

$$n_{\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}} = \frac{g}{M} = \frac{0.2389}{5 \times 22.99 + 3 \times 30.97 + 10 \times 16.00} = \frac{0.2389}{367.86} = 0.0006494 \text{ moles}$$

A partir de la estequiometría de los compuestos tenemos:

$$n_{\text{P}} = 3 \times n_{\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}}$$

$$n_{\text{P}} = 2 \times n_{\text{P}_2\text{O}_5}$$

Igualando:

$$n_{\text{P}_2\text{O}_5} = \frac{3}{2} \times n_{\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}} = \frac{3}{2} \times 0.0006494 = 0.0009741 \text{ moles}$$

Finalmente:

$$g_{\text{P}_2\text{O}_5} = n_{\text{P}_2\text{O}_5} \times M_{\text{P}_2\text{O}_5} = 0.0009741 \times 141.94 = 0.1383 \text{ g}$$

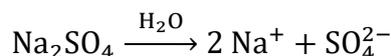
También podría haberse aplicado el método tradicional de los factores molares y de cambio de unidades:

$$\begin{aligned} \text{Factor molar} &= \frac{1 \text{ mol P}_2\text{O}_5}{2 \text{ moles P}} & \text{Factor molar} &= \frac{1 \text{ mol Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}}{3 \text{ moles P}} \\ 0.2389 \text{ g Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10} &\times \frac{1 \text{ mol Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}}{367.86 \text{ g Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}} \times \frac{3 \text{ moles P}}{1 \text{ mol Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}} \times \frac{1 \text{ mol P}_2\text{O}_5}{2 \text{ moles P}} \times \frac{141.94 \text{ g P}_2\text{O}_5}{1 \text{ mol P}_2\text{O}_5} &= 0.1383 \text{ g P}_2\text{O}_5 \end{aligned}$$

Aunque este procedimiento es demasiado automático y puede ser difícil de aplicar a problemas complicados con varios equilibrios. Sin embargo, es útil en la visualización de las unidades utilizadas.

### Disociación de sales

De igual forma puede actuarse para conocer las concentraciones de iones obtenidos en la disolución de sales. Por ejemplo, al disolver en agua sulfato sódico,  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ , este se disocia completamente en el catión sodio ( $\text{Na}^+$ ) y el anión sulfato ( $\text{SO}_4^{2-}$ ):



al completarse la disolución la concentración de los iones será:

$$\begin{aligned} [\text{Na}_2\text{SO}_4] &= C_{\text{Na}_2\text{SO}_4} - x = 0 \quad \rightarrow \quad x = C_{\text{Na}_2\text{SO}_4} \\ [\text{Na}^+] &= 2x = 2 C_{\text{Na}_2\text{SO}_4} \\ [\text{SO}_4^{2-}] &= x = C_{\text{Na}_2\text{SO}_4} \end{aligned}$$

En el caso de que se disuelvan varias sales se suman las contribuciones de cada una. Así, al disolver  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  y  $\text{Na}_3\text{PO}_4$ :

$$[\text{Na}^+] = 2 C_{\text{Na}_2\text{SO}_4} + 3 C_{\text{Na}_3\text{PO}_4}$$

**Problema 6:** Determina la concentración de cloruro en la disolución que se obtiene al disolver 0.3564 g de  $\text{KCl}$  y 0.2825 g de  $\text{MgCl}_2$  en 250 mL de agua.

$$n_{\text{KCl}} = \frac{0.3564}{74.55} = 0.004781 \text{ moles} \quad n_{\text{MgCl}_2} = \frac{0.2825}{95.21} = 0.002967 \text{ moles}$$

$$C_{\text{KCl}} = \frac{0.004781}{0.25} = 0.01912 \text{ M} \quad C_{\text{MgCl}_2} = \frac{0.002967}{0.25} = 0.01187 \text{ M}$$

Finalmente:

$$[\text{Cl}^-] = C_{\text{KCl}} + 2 \times C_{\text{MgCl}_2} = 0.04286 \text{ M}$$

## 7. Cálculos en el equilibrio

El equilibrio en una reacción química está determinado por su constante de equilibrio que establece el valor del cociente de reacción que se cumple cuando la reacción alcanza el equilibrio. Por ejemplo para la reacción redox:



Para obtener las concentraciones en el equilibrio debe plantearse un sistema de ecuaciones con tantas ecuaciones como incógnitas, para ello, es necesario recurrir a diferentes balances, los más importantes se describen a continuación.

### Balances de reacción (o de grado de avance)

Los balances de reacción permiten una descripción completa del sistema en equilibrio. Supongamos una concentración inicial de 0.06 M de  $\text{FeCl}_3$  y 0.1 M de KI, al alcanzar el equilibrio las concentraciones serán:

$$[\text{Fe}^{3+}] = 0.06 - 2x$$

$$[\text{I}^-] = 0.1 - 3x$$

$$[\text{Fe}^{2+}] = 2x$$

$$[\text{I}_3^-] = x$$

Que con la constante de equilibrio forman un conjunto de 5 ecuaciones para 5 incógnitas: las cuatro concentraciones y el grado de avance. Ahora, solo hay que sustituir los balances en la constante y se obtiene una ecuación con una incógnita:

$$K = \frac{[\text{Fe}^{2+}]^2[\text{I}_3^-]}{[\text{Fe}^{3+}]^2[\text{I}^-]^3} = \frac{(2x)^2x}{(0.06 - 2x)^2(0.1 - 3x)^3}$$

En este caso la ecuación debe resolverse por métodos numéricos y el resultado es  $x=0.029436$ , sustituyendo en los balances se obtienen las concentraciones en el equilibrio:

$$[\text{Fe}^{3+}] = 0.06 - 2x = 0.06 - 2 \times 0.029436 = 0.001128 \text{ M}$$

$$[\text{I}^-] = 0.1 - 3x = 0.1 - 3 \times 0.029436 = 0.011692 \text{ M}$$

$$[\text{Fe}^{2+}] = 2x = 2 \times 0.029436 = 0.058872 \text{ M}$$

$$[\text{I}_3^-] = x = 0.029436 \text{ M}$$

Podemos ver que estas concentraciones cumplen la constante de equilibrio:

$$K = \frac{[\text{Fe}^{2+}]^2[\text{I}_3^-]}{[\text{Fe}^{3+}]^2[\text{I}^-]^3} = \frac{0.058872^2 \times 0.029436}{0.001128^2 \times 0.011692^3} = 10^{7.700}$$

### Balance de materia o masas

Los moles de los elementos que intervienen en la reacción se conservan por lo que, los moles iniciales igualan a los finales:

$$\sum_{i=1}^N \omega_{A,i} n_i^o = \sum_{i=1}^N \omega_{A,i} n_i$$

donde A es el elemento al que se le aplica el balance,  $n_i^o$  son los moles iniciales del compuesto  $i$ ,  $n_i$  los moles en el equilibrio y  $\omega_{A,i}$  el número de átomos del elemento A en el compuesto  $i$ . Cuando el **volumen es constante**, pueden utilizarse concentraciones dividiendo por el volumen (V) ambos términos del balance:

$$\sum_{i=1}^N \omega_{A,i} \frac{n_i^o}{V} = \sum_{i=1}^N \omega_{A,i} \frac{n_i}{V}$$

$$\sum_{i=1}^N \omega_{A,i} C_i = \sum_{i=1}^N \omega_{A,i} [A_{\omega_{A,i}}]_i$$

Por ejemplo, en el caso de la reacción que nos sirve de ejemplo:

$$C_{\text{Fe}^{3+}} = C_{\text{FeCl}_3} = 0.06 = [\text{Fe}^{3+}] + [\text{Fe}^{2+}]$$

$$C_{\text{I}^-} = C_{\text{KI}} = 0.1 = [\text{I}^-] + 3[\text{I}_3^-]$$

El balance de masas puede aplicarse a elementos o grupos de elementos que permanezcan inalterados durante las reacciones (por ejemplo sulfato o acetato).

### Balance de cargas

Este balance puede realizarse de dos formas:

1) Como la carga se mantiene constante durante la reacción puede plantearse igual que el balance de materia igualando las cargas iniciales y las del equilibrio pero considerando solo las especies que intervienen en la reacción. Para la reacción anterior:

$$3C_{\text{Fe}^{3+}} - C_{\text{I}^-} = 3[\text{Fe}^{3+}] + 2[\text{Fe}^{2+}] - [\text{I}^-] - [\text{I}_3^-]$$

$$0.18 - 0.1 = 3[\text{Fe}^{3+}] + 2[\text{Fe}^{2+}] - [\text{I}^-] - [\text{I}_3^-]$$

La aparición de signos negativos hace que este procedimiento sea poco utilizado.

2) La forma más común es suponer que la disolución es neutra y su carga inicial cero por lo que se igualan las cargas positivas y las negativas totales en el equilibrio. En este caso deben incluirse todos los iones, no solo los que intervienen en la reacción:

$$[\text{K}^+] + 3[\text{Fe}^{3+}] + 2[\text{Fe}^{2+}] = [\text{Cl}^-] + [\text{I}^-] + [\text{I}_3^-]$$

Este procedimiento exige cuantificar la concentración de los iones que no intervienen en la reacción. En este caso:

$$[\text{Cl}^-] = 3C_{\text{FeCl}_3} = 3 \times 0.06 = 0.18 \text{ M}$$

$$[\text{K}^+] = C_{\text{KI}} = 0.1 \text{ M}$$

Sustituyendo:

$$0.1 + 3[\text{Fe}^{3+}] + 2[\text{Fe}^{2+}] = 0.18 + [\text{I}^-] + [\text{I}_3^-]$$

Que, como es lógico, da lugar a la misma ecuación final.

### Balances estequiométricos

Se obtienen considerando las relaciones estequiométricas entre las especies que participan en la reacción, por ejemplo, cuando inicialmente la concentración de los productos de una

reacción es cero, su concentración estará siempre en proporción estequiométrica pues se forman como consecuencia del avance de la reacción:

$$x = \frac{C_{\text{Fe}^{3+}} - [\text{Fe}^{3+}]}{2} = \frac{C_{\text{I}^-} - [\text{I}^-]}{3} = \frac{C_{\text{Fe}^{2+}} - [\text{Fe}^{2+}]}{2} = \frac{C_{\text{I}_3^-} - [\text{I}_3^-]}{1}$$

para la reacción entre el Fe(III) y el yoduro, si  $C_{\text{Fe}^{2+}} = 0$  y  $C_{\text{I}_3^-} = 0$ :

$$\frac{[\text{Fe}^{2+}]}{2} = \frac{[\text{I}_3^-]}{1}$$

Además, cuando los reactivos están inicialmente en proporciones estequiométricas las concentraciones en el equilibrio también lo estarán. En el ejemplo anterior:

$$\text{si } \frac{C_{\text{Fe}^{3+}}}{2} = \frac{C_{\text{I}^-}}{3} \quad \rightarrow \quad \frac{[\text{Fe}^{3+}]}{2} = \frac{[\text{I}^-]}{3}$$

Los balances de protones utilizados en equilibrios ácido-base y los de electrones utilizados en equilibrios redox son balances estequiométricos. En realidad, todos los balances pueden obtenerse a partir de los balances de reacción combinándolos para eliminar el grado de avance. En el ejemplo que estamos tratando:

$$\begin{array}{ll} [\text{Fe}^{3+}] = C_{\text{Fe}} - 2x & \\ [\text{Fe}^{2+}] = 2x & \text{sumando:} \quad C_{\text{Fe}} = [\text{Fe}^{3+}] + [\text{Fe}^{2+}] \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} [\text{I}^-] = C_{\text{I}} - 3x & \\ [\text{I}_3^-] = x & \text{sumando:} \quad C_{\text{I}} = [\text{I}^-] + 3[\text{I}_3^-] \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} [\text{Fe}^{2+}] = 2x & \\ [\text{I}_3^-] = x & \text{sustituyendo:} \quad \frac{[\text{Fe}^{2+}]}{2} = \frac{[\text{I}_3^-]}{1} \end{array}$$

Finalmente sumando los cuatro balances multiplicados por la carga se obtiene el balance de cargas:

$$3[\text{Fe}^{3+}] + 2[\text{Fe}^{2+}] + 0.1 = [\text{I}^-] + [\text{I}_3^-] + 0.18$$

### Resolución de problemas de equilibrio

En general los problemas de equilibrio donde intervienen varias reacciones se resuelven de forma exacta utilizando **balances de conservación** como los balances de materia y el balance de cargas junto con las constantes de equilibrio. El número de balances independientes necesarios viene dado por la diferencia entre las especies que intervienen en los equilibrios (E) y el número de equilibrios que tienen lugar (R), esto es  $B = E - R$ . De esta forma se obtendrá un sistema de ecuaciones con tantas ecuaciones ( $R + B = \text{constantes de equilibrio} + \text{balances de conservación} = E$ ) como incógnitas (E). En el caso que estamos estudiando hay cuatro incógnitas y necesitamos cuatro ecuaciones: la constante de equilibrio y tres balances, los dos balances de masas y el balance de cargas o el balance estequiométrico:

$$K = \frac{[\text{Fe}^{2+}]^2 [\text{I}_3^-]}{[\text{Fe}^{3+}]^2 [\text{I}^-]^3}$$

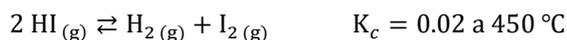
$$C_{\text{Fe}} = [\text{Fe}^{3+}] + [\text{Fe}^{2+}]$$

$$C_{\text{I}} = [\text{I}^-] + 3[\text{I}_3^-]$$

$$\frac{[\text{Fe}^{2+}]}{2} = \frac{[\text{I}_3^-]}{1}$$

Sin embargo, si hay **solo un equilibrio** es más sencillo utilizar los **balances de grado de avance** como vimos anteriormente. Veamos otro ejemplo:

**Problema 7:** El yoduro de hidrógeno, HI, se descompone de acuerdo con la reacción:



Determina la concentraciones en el equilibrio si inicialmente se tienen 4 moles de HI en un reactor de 10 L a 450 °C

La concentración inicial es:

$$C_{\text{HI}} = \frac{n}{V} = \frac{4}{10} = 0.4 \text{ mol/L}$$

Los balances de reacción serán:

$$[\text{HI}] = 0,4 - 2x$$

$$[\text{H}_2] = x$$

$$[\text{I}_2] = x$$

Sustituyendo en la constante de equilibrio:

$$K_c = \frac{[\text{H}_2][\text{I}_2]}{[\text{HI}]^2} = \frac{x^2}{(0.4 - x)^2} = 0.02$$

En este caso puede sacarse la raíz cuadrada:

$$\frac{x}{0.4 - x} = \sqrt{0.02} = 0.1414$$

Resolviendo:

$$x = \frac{0.05656}{1.1414} = 0.0496$$

Y sustituyendo en los balances de la reacción:

$$[\text{HI}] = 0,4 - 2x = 0.4 - 2 \times 0.0496 = 0.3009 \text{ M}$$

$$[\text{H}_2] = x = 0.0496 \text{ M}$$

$$[\text{I}_2] = x = 0.0496 \text{ M}$$

### ***Simplificaciones: reactivo limitante***

En los cálculos en el equilibrio pueden hacerse simplificaciones cuando la reacción experimenta un grado de avance pequeño (valor de K cercano a cero) o muy grande (reacción cuantitativa). Una **reacción es cuantitativa** cuando tiene lugar completamente o cuando el equilibrio está suficientemente desplazado de los reactivos a los productos (la constante de equilibrio es suficientemente alta). En estas reacciones, puede suponerse que se alcanzará el grado de avance máximo posible, en el cual se habrá consumido totalmente el **reactivo limitante** (RL). Por ello, para conocer el reactivo limitante se calcula el grado de avance máximo que podría lograrse si se consume totalmente cada uno de los reactivos y el que proporcione un grado de avance menor, será el reactivo limitante. Cuando la reacción alcance ese grado de avance se detendrá puesto que se habrá agotado el RL. Al aplicar esta simplificación se obtienen todas las concentraciones menos

la del reactivo limitante que dará cero. En realidad su concentración será pequeña pero no cero pues la reacción no será completamente cuantitativa dado debe cumplir la constante de equilibrio. Para obtener la concentración del RL se vuelve a resolver el equilibrio inverso desde la posición obtenida con el RL como vemos en el siguiente ejemplo.

**Problema 8:** Se prepara una disolución con concentraciones iniciales 0.05 M de  $\text{Ca}^{2+}$  y 0.08 M de  $\text{F}^-$ . Determina la concentración de iones  $\text{Ca}^{2+}$  en el equilibrio, si tiene lugar la siguiente reacción de precipitación:



Como la constante es muy elevada, se supondrá que la reacción es cuantitativa, el grado de avance será cercano al máximo y se aplicará la **aproximación del reactivo limitante**. El grado de avance máximo que se puede alcanzar con cada reactivo será:

$$[\text{Ca}^{2+}] = [\text{Ca}^{2+}]_0 - x_{\text{Ca}} = 0 \quad x_{\text{Ca}} = \frac{0.05}{1} = 0.05$$

$$[\text{F}^-] = [\text{F}^-]_0 - 2x_{\text{F}} = 0 \quad x_{\text{F}} = \frac{0.08}{2} = 0.04$$

como  $x_{\text{F}} < x_{\text{Ca}}$  el reactivo limitante es el ion  $\text{F}^-$  y el grado de avance final será  $x=0.04$ , por lo que:

$$[\text{Ca}^{2+}] = [\text{Ca}^{2+}]_0 - x = 0.05 - 0.04 = 0.01 \text{ M}$$

$$[\text{F}^-] = [\text{F}^-]_0 - 2x = 0.08 - 2 \times 0.04 = 0$$

$$[\text{CaF}_2(\text{s})] = x = 0.04 \text{ M}$$

Así pues, si la reacción tiene lugar completamente se formarán 0.04 moles de  $\text{CaF}_2$  sólido por litro de disolución y quedarán sin precipitar 0.01 moles por litro de  $\text{Ca}^{2+}$ . En realidad el equilibrio no tiene lugar completamente. Por ello, para calcular la concentración de  $\text{F}^-$  que quedará libre en disolución sin precipitar, tenemos que volver a resolver el equilibrio, pero ahora el de solubilidad partiendo de la posición obtenida con el reactivo limitante:



Ahora tenemos  $\text{CaF}_2(\text{s})$  precipitado y  $\text{Ca}^{2+}$  0.01 M en disolución, los balances de avance de la reacción serán:

$$[\text{CaF}_2(\text{s})] = 0.04 - x$$

$$[\text{Ca}^{2+}] = 0.01 + x \cong 0.01$$

$$[\text{F}^-] = 0 + 2 \times x$$

Como la reacción tiene una constante muy pequeña, aplicaremos la **simplificación de suponer que el avance es cercano a cero** y  $x \ll 0.01$ , y sustituyendo en la constante:

$$K_{\text{s}} = [\text{Ca}^{2+}][\text{F}^-]^2 = 0.01 \times [\text{F}^-]^2 = 10^{-10.5} \quad [\text{F}^-] = \sqrt{\frac{10^{-10.5}}{0.01}} = 5.6 \times 10^{-5} \text{ M}$$

Resumiendo, una vez aplicado el RL, para obtener su concentración se sustituyen en la constante las concentraciones obtenidas y se resuelve la ecuación para el reactivo limitante.

Un caso especial se produce cuando los reactivos están inicialmente en proporciones estequiométricas como veremos en el ejemplo siguiente.

**Problema 9:** El Fe(III) oxida el yoduro a triyoduro ( $\log K = 7.7$ ) reduciéndose a Fe(II). Si inicialmente se tiene  $\text{FeCl}_3$  0.06 M y KI 0.09 M, calcula las concentraciones en el equilibrio aplicando la simplificación del reactivo limitante.

La reacción es:



Las concentraciones iniciales serán  $C_{\text{Fe}^{3+}} = 0.06$  M y  $C_{\text{I}^-} = 0.09$  M. Si aplicamos la simplificación del reactivo limitante, el grado de avance máximo que se podrá alcanzar para cada especie será:

$$x_{\text{Fe}} = \frac{C_{\text{Fe}^{3+}}}{2} = \frac{0.06}{2} = 0.03$$

$$x_{\text{I}} = \frac{C_{\text{I}^-}}{3} = \frac{0.09}{3} = 0.03$$

Ambos reactivos proporcionan el mismo grado de avance máximo, puesto que inicialmente están en proporciones estequiométricas, por lo que ambas se consumirán totalmente cuando  $x=0.03$ :

$$[\text{Fe}^{3+}] = 0.06 - 2x = 0.06 - 2 \times 0.03 = 0.0$$

$$[\text{I}^-] = 0.09 - 3x = 0.09 - 3 \times 0.03 = 0.0$$

$$[\text{Fe}^{2+}] = 2x = 2 \times 0.03 = 0.06 \text{ M}$$

$$[\text{I}_3^-] = x = 0.03 \text{ M}$$

En realidad, en el equilibrio quedará una pequeña concentración de las dos especies para cumplir la constante de equilibrio. Como hemos visto, si consideramos el grado de avance:

$$x = \frac{C_{\text{Fe}^{3+}} - [\text{Fe}^{3+}]}{2} = \frac{C_{\text{I}^-} - [\text{I}^-]}{3}$$

y como inicialmente:

$$\frac{C_{\text{Fe}^{3+}}}{2} = \frac{C_{\text{I}^-}}{3}$$

se deduce que:

$$\frac{[\text{Fe}^{3+}]}{2} = \frac{[\text{I}^-]}{3} \quad \rightarrow \quad [\text{Fe}^{3+}] = \frac{2}{3}[\text{I}^-]$$

Esto es, cuando los reactivos están inicialmente en proporciones estequiométricas también lo estarán en el equilibrio, por lo que es posible plantear una relación estequiométrica entre sus concentraciones. Sustituyendo en la constante de equilibrio:

$$K = 10^{7.7} = \frac{[\text{Fe}^{3+}]^2[\text{I}_3^-]}{[\text{Fe}^{2+}]^2[\text{I}^-]^3} = \frac{(0.06)^2 \times 0.03}{(2/3)^2[\text{I}^-]^2[\text{I}^-]^3} = \frac{2.43 \times 10^{-4}}{[\text{I}^-]^5}$$

de donde:

$$[\text{I}^-] = \left( \frac{2.43 \times 10^{-4}}{10^{7.7}} \right)^{\frac{1}{5}} = 0.00546 \text{ M}$$

y, por lo tanto:

$$[\text{Fe}^{3+}] = \frac{2}{3}[\text{I}^-] = \frac{2}{3} \times 0.00546 = 0.00364 \text{ M}$$

Cuantitatividad, conversión y rendimiento

En relación con la **cuantitatividad** están los conceptos de **conversión** y **rendimiento**. Aunque no son sinónimos pues la cuantitatividad hace referencia al desplazamiento que se alcanza en el equilibrio mientras los otros se centran en la fracción de reactivo que ha reaccionado, o la fracción de producto que se puede obtener, el cálculo es similar en ausencia de reacciones laterales. Se compara el grado de avance máximo posible ( $x_{max}$ , que se alcanzaría si todo el reactivo limitante, A, reaccionase) y el grado de avance obtenido cuando se alcanza el equilibrio o finaliza la reacción ( $x_{final}$ ). Para una sola reacción tendremos:

$$\% \text{ Cuantitatividad, conversión, rendimiento} = \frac{\xi_{final}}{\xi_{max}} \times 100 = \frac{n_A^o - n_A}{n_A^o} \times 100 = \frac{n_P - n_P^o}{n_{P,max} - n_P^o} \times 100$$

donde  $n_A^o$  y  $n_A$  son los moles iniciales y finales del reactivo limitante A,  $n_P^o$  y  $n_P$  los moles iniciales y finales del producto P y  $n_{P,max}$  los moles de producto que se formarían si todo el reactivo limitante hubiese reaccionado que considerando el grado de avance es:

$$n_{P,max} = n_P^o + p \frac{n_A^o}{a}$$

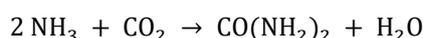
donde  $a$  y  $p$  son los coeficientes estequiométricos del reactivo limitante y del producto. En el caso de que el volumen fuese constante pueden utilizarse concentraciones.

**Problema 10:** La urea,  $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ , se utiliza como fertilizante. La reacción que se emplea para su producción, sin ajustar, es:



Ajusta la reacción y determina el rendimiento si al mezclar un mol de amoníaco y un mol de dióxido de carbono se forman 24.7 g de urea.

La reacción ajustada es:



Los moles de urea que se han formado son:

$$n_{\text{urea},\text{final}} = \frac{24.7}{60.06} = 0.411 \text{ moles}$$

Dado que inicialmente no hay urea, el grado de avance final alcanzado es:

$$\xi_{\text{final}} = \frac{0.411}{1} = 0.411 \text{ moles}$$

El grado de avance máximo que se puede alcanzar con cada reactivo será:

$$\xi_{\text{NH}_3} = \frac{1}{2} = 0.5 \text{ moles} \quad \xi_{\text{CO}_2} = \frac{1}{1} = 1 \text{ moles}$$

Por ello, el reactivo limitante es el amoníaco y el grado de avance máximo  $\xi_{\text{max}} = \xi_{\text{NH}_3} = 0.5$  moles y los moles de urea que se podrían haber formado:

$$n_{\text{urea},\text{max}} = \xi_{\text{max}} = 0.5 \text{ moles}$$

La cuantitatividad de la reacción será:

$$\% Q = \frac{\xi_{\text{final}}}{\xi_{\text{max}}} \times 100 = \frac{0.411}{0.5} \times 100 = 82.2 \%$$

Y si lo calculamos como rendimiento:

$$\% R = \frac{n_P - n_P^o}{n_{P,max} - n_P^o} \times 100 = \frac{0.411 - 0}{0.5 - 0} \times 100 = 82.2 \%$$

**8.- Nomenclatura química básica***Valencias usuales*

Li, Na, K: +1	F: -1
Be, Mg, Ca, Sr, Ba: +2	O: -2
Fe, Co, Ni: +2, +3	H: +1, -1
Cu, Hg: +1, +2	Cl, Br, I: +1, +3, +5, +7, -1
B, Al, Bi: +3	S, Se, Te: +4, +6, -2
Sn, Pb: +2, +4	N, P: +3, +5, -3

*Nombres usuales de algunos cationes*

$\text{Na}^+$ : ion sodio	$\text{Cu}^+$ : ion cobre(I); ion cuproso
$\text{Fe}^{2+}$ : ion hierro(II); ion ferroso	$\text{Fe}^{3+}$ : ion hierro(III); ion férrico
$\text{NH}_4^+$ : amonio	
$\text{H}_3\text{O}^+$ : ion hidronio (oxonio) (para simplificar se suele escribir como $\text{H}^+$ )	

*Nombres usuales de algunos aniones*

$\text{H}^-$ : hidruro	$\text{F}^-$ : fluoruro	$\text{Cl}^-$ : cloruro	
$\text{Br}^-$ : bromuro	$\text{I}^-$ : yoduro	$\text{I}_3^-$ : triyoduro	
$\text{S}^{2-}$ : sulfuro	$\text{HS}^-$ : hidrogenosulfuro		
$\text{CN}^-$ : cianuro	$\text{SCN}^-$ : tiocianato (sulfocianuro)		
$\text{OH}^-$ : hidróxido	$\text{O}^{2-}$ : oxido	$\text{O}_2^{2-}$ : peróxido	
$\text{NO}_3^-$ : nitrato	$\text{NO}_2^-$ : nitrito		
$\text{ClO}_4^-$ : perclorato	$\text{ClO}_3^-$ : clorato	$\text{ClO}_2^-$ : clorito	$\text{ClO}^-$ : hipoclorito
$\text{CO}_3^{2-}$ : carbonato	$\text{HCO}_3^-$ : hidrogenocarbonato (bicarbonato)		
$\text{PO}_4^{3-}$ : fosfato	$\text{HPO}_4^{2-}$ : hidrogenofosfato	$\text{H}_2\text{PO}_4^-$ : dihidrogenofosfato	
$\text{SO}_4^{2-}$ : sulfato	$\text{HSO}_4^-$ : hidrogenosulfato	$\text{SO}_3^{2-}$ : sulfito	
$\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ : tiosulfato	$\text{S}_4\text{O}_6^{2-}$ : tetracionato		
$\text{MnO}_4^-$ : permanganato	$\text{CrO}_4^{2-}$ : cromato	$\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ : dicromato	
$\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2^-$ : acetato	$\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$ : oxalato		
$\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$ : Ferricianuro, hexacianoferrato (III)			
$\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$ : Ferrocianuro, hexacianoferrato (II)			

*Nombres comunes de algunos compuestos*

NaCl : cloruro sódico	MgSO <sub>4</sub> : sulfato de magnesio	
NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub> : nitrato de amonio	Ca <sub>3</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> : fosfato de calcio	
Ca(H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> : dihidrogenofosfato de calcio		
Na <sub>2</sub> S <sub>2</sub> O <sub>3</sub> : tiosulfato de sodio	KHCO <sub>3</sub> : bicarbonato de potasio	
CoCl <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O: cloruro de cobalto(II) hexahidrato		
FeCl <sub>2</sub> : cloruro de hierro(II)	Fe(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> : nitrato de hierro(III)	
K <sub>2</sub> Cr <sub>2</sub> O <sub>7</sub> : dicromato de potasio	KMnO <sub>4</sub> : permanganato de potasio	
FeO : óxido de hierro(II); óxido ferroso	CaO : óxido de calcio	
H <sub>2</sub> O : agua	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> : peróxido de hidrógeno	CO <sub>2</sub> : dióxido de carbono

*Nombres comunes de algunos ácidos*

HCl : ácido clorhídrico (cloruro de hidrógeno)	
H <sub>2</sub> S : ácido sulfhídrico (sulfuro de hidrógeno)	
HCN : ácido cianhídrico (cianuro de hidrógeno)	
HClO <sub>4</sub> : ácido perclórico	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> : ácido sulfúrico
H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> : ácido fosfórico	H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> : ácido carbónico
HNO <sub>3</sub> : ácido nítrico	HNO <sub>2</sub> : ácido nitroso
B(OH) <sub>3</sub> : ácido bórico (a veces se escribe como metabórico HBO <sub>2</sub> para simplificar)	
CH <sub>3</sub> COOH : ácido acético	H <sub>2</sub> C <sub>2</sub> O <sub>4</sub> : ácido oxálico

*Nombres comunes de algunas bases*

NaOH : hidróxido de sodio	KOH : hidróxido de potasio	
Ca(OH) <sub>2</sub> : hidróxido de calcio		
NH <sub>3</sub> : amoníaco	CH <sub>3</sub> NH <sub>2</sub> : metilamina	H <sub>2</sub> NCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> NH <sub>2</sub> : etilendiamina

**Problema 12.** Formular las siguientes especies: yodo, triyoduro, yoduro, cromato, dicromato, permanganato, carbonato, fosfato, sulfato, tiosulfato, hidrogenosulfato, bicarbonato, ácido oxálico.

**9. Resolución de ecuaciones**

$$2x-3 = 1 \quad \rightarrow \quad 2x = 1+3 \quad \rightarrow \quad 2x = 4 \quad \rightarrow \quad x = \frac{4}{2} = 2$$

$$\ln(8x) = 2 \quad \rightarrow \quad e^{\ln(8x)} = e^2 \quad \rightarrow \quad 8x = 7.39 \quad \rightarrow \quad x = \frac{7.39}{8} = 0.92$$

$$pC = -\log(C) = 2.64 \quad \rightarrow \quad \log(C) = -pC \quad \rightarrow \quad C = 10^{\log(C)} = 10^{-pC} = 10^{-2.64} = 0.0023$$

$$\frac{4}{x} \sqrt{\frac{x}{2}} = 4 \quad \rightarrow \quad \sqrt{\frac{16x}{x^2 \cdot 2}} = 4 \quad \rightarrow \quad \sqrt{\frac{8}{x}} = 4 \quad \rightarrow \quad \frac{8}{x} = 16 \quad \rightarrow \quad x = \frac{8}{16} = 0.5$$

$$ax^2 + bx + c = 0 \quad \rightarrow \quad x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

**Problema 13:** Resolver las siguientes ecuaciones

a)  $2(x + 5) = -2$

i)  $-10 = 10(k - 9)$

b)  $\frac{x + 6}{-16} = -1$

j)  $6 = \frac{a}{4} + 2$

c)  $0 = 4 + \frac{x}{5}$

k)  $\ln(1 + h) = 2$

d)  $9x - 7 = -7$

l)  $\frac{2}{\log(p)} = 6$

e)  $-4 = \frac{x}{20} - 5$

m)  $10^{2+y} = 20$

f)  $-6 + \frac{r}{4} = -5$

n)  $\frac{y}{2} \sqrt{\frac{18}{y}} = \frac{6}{y}$

g)  $\frac{m}{9} - 1 = -2$

o)  $x^2 - x - 1 = 0$

h)  $\frac{v + 9}{3} = 8$

**Soluciones:** a)  $x = -6$ , b)  $x = 10$ , c)  $x = -20$ , d)  $x = 0$ , e)  $x = 20$ , f)  $r = 4$ , g)  $m = -9$ , h)  $v = 15$ , i)  $k = 8$ , j)  $a = 16$ , k)  $h = 6.389$ , l)  $p = 2.154$ , m)  $y = -0.699$ , n)  $y = 2$ , o)  $x = 1.61803$  y  $-0.61803$