



Academia de Química

Tema 5

Estequiometría

Cálculos estequiométricos: reactivos limitante y en exceso, rendimientos teórico, experimental y porcentual.

División de Ciencias Básicas

Facultad de Ingeniería

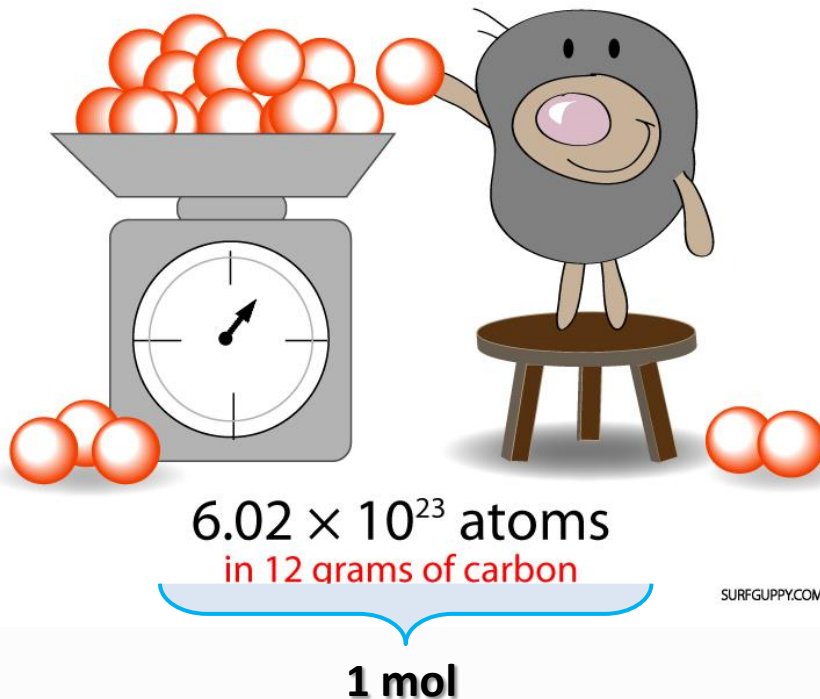
Dra. Patricia García Vázquez

28/04/16



Conocimientos previos

- Número de Avogadro (N_A)
- Masa molar (MM)
- Ley de la conservación de la materia
- Manejo de factores de conversión

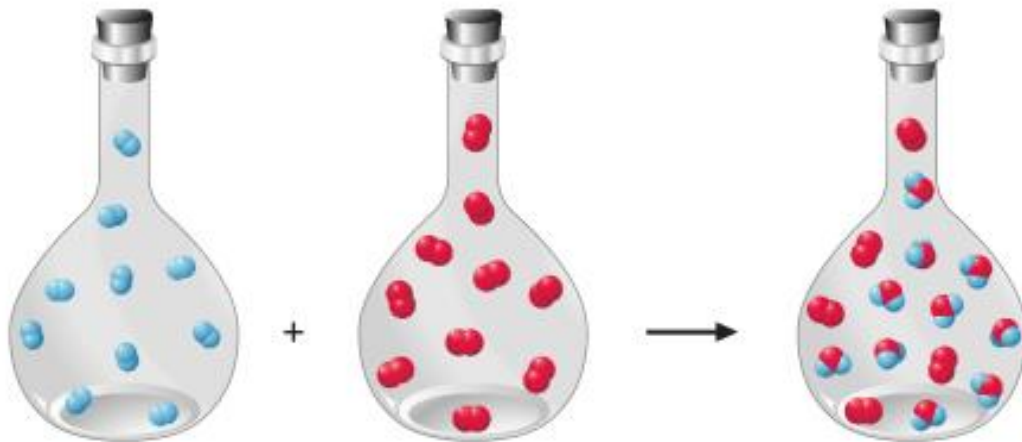


1 mol de sustancia:

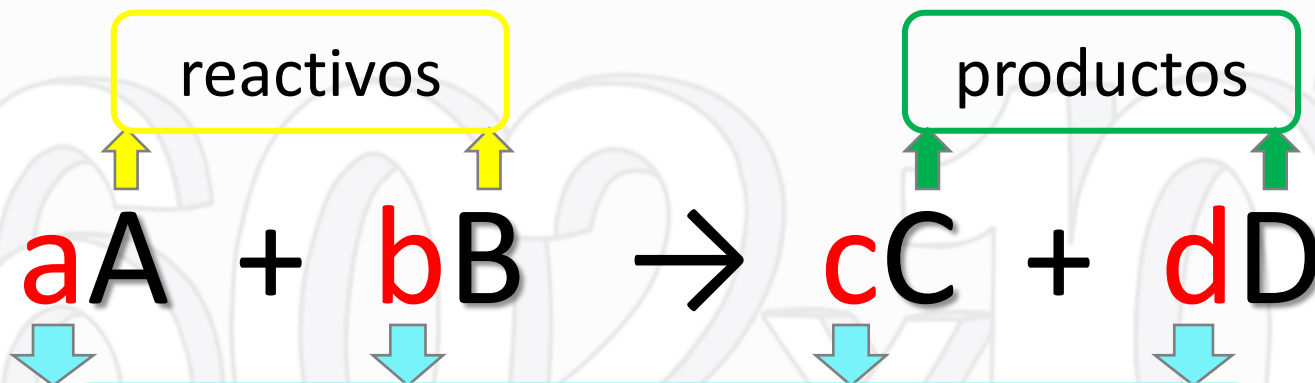
- átomos
- iones
- moléculas
- etc.

Estequiometría

“Estudio cuantitativo de reactivos y productos en una reacción química”



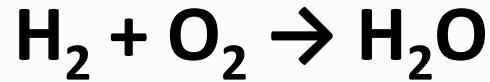
Representación de las reacciones químicas



Coeficientes estequiométricos

- Se usan para balancear la reacción y asegurarnos de que se cumpla la Ley de la conservación de la materia
- Indican el número de moles de reactivos y productos, estableciendo las proporciones necesarias para que se lleve a cabo la reacción.

Ejemplo de una reacción y consideraciones para balancearla:



Los coeficientes de la reacción son "1" :

$1\text{H}_2 + 1\text{O}_2 \rightarrow 1\text{H}_2\text{O}$
pero en química los omitimos

Balanceo:



$2\text{H}_2\text{O}$ indica 2 moles de **agua**



H_2O_2 indica 1 mol de **peróxido de hidrógeno**



Si se alteran los subíndices, se altera la composición química y por lo tanto las propiedades

- Sólo pueden modificarse los coeficientes estequiométricos, no los subíndices de los reactivos o productos para balancear la reacción.

Cálculos estequiométricos en una reacción

- Se recomienda realizar los cálculos estequiométricos en base a “moles” de reactivos y productos.
- Para obtener moles a partir de la masa o viceversa utilizar la masa molar como factor de conversión:

¿A cuantas moles corresponden 25 g de S?. Determine la masa contenida en 2 moles de S.

De tabla periódica $MM_S = 32.064 \text{ [g/mol]}$
 $1 \text{ mol S} = 32.064 \text{ [g/mol]}$

Factores de conversión

$$\left\{ \left(\frac{1 \text{ mol S}}{32.064 \text{ g S}} \right) \text{ ó } \left(\frac{32.064 \text{ g S}}{1 \text{ mol S}} \right) \right.$$

$$25 \text{ g S} \left(\frac{1 \text{ mol S}}{32.064 \text{ g S}} \right) = 0.780 \text{ [mol] S}$$

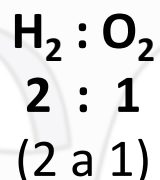
~~$$25 \text{ g S} \left(\frac{32.064 \text{ g S}}{1 \text{ mol S}} \right) = 801.6 \text{ [g}^2\text{/mol] S}$$~~

$$2 \text{ mol S} \left(\frac{32.064 \text{ g S}}{1 \text{ mol S}} \right) = 64.128 \text{ [g] S}$$

Relaciones Molares

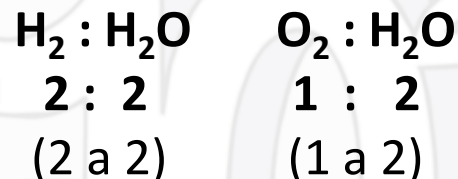


Relación molar entre reactivos:



Por cada mol de O_2 se necesitan 2 mol de H_2 para que se lleve a cabo la reacción.

Relación molar entre reactivos y producto:

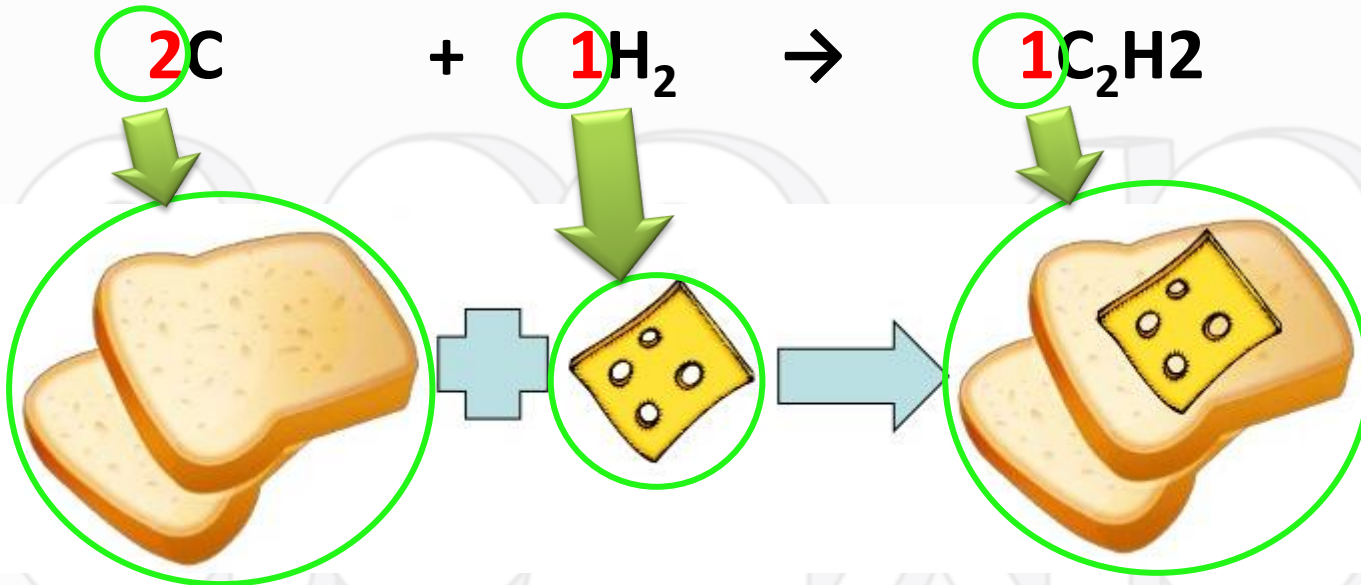


Por cada 2 mol de H_2 que reaccionan con 1 mol de O_2 se obtienen 2 mol de H_2O



De las relaciones molares se derivan factores de conversión para el cálculo de cantidades estequiométricas de reactivos y productos en una reacción.

Analogía para las relaciones molares



Se necesitan 2 rebanadas de pan por cada rebanada de queso para preparar 1 sándwich

Relación molares:

pan : queso

2 : 1

pan : sándwich

2 : 1

queso : sándwich

1 : 1

Cálculos estequiométricos en una reacción

Cuando se calienta polvo para hornear (bicarbonato de sodio NaHCO_3) libera dióxido de carbono gaseoso, que es el responsable de que se esponjen las galletas, las donas y el pan. Calcule la masa de NaHCO_3 que se requiere para producir 20.5 [g] de CO_2 , de acuerdo a la siguiente reacción:



Utilizando el método de factores de conversión:

$$20.5 \text{ g CO}_2 \left(\frac{1 \text{ mol CO}_2}{44 \text{ g CO}_2} \right) \left(\frac{2 \text{ mol NaHCO}_3}{1 \text{ mol CO}_2} \right) \left(\frac{84 \text{ g NaHCO}_3}{1 \text{ mol NaHCO}_3} \right) = 78.27 \text{ [g] NaHCO}_3$$

MM CO_2 para obtener moles a partir de la masa

Relación molar entre CO_2 y NaHCO_3

MM NaHCO_3 para obtener la masa correspondiente a partir de moles

Cálculo de masas molares:

$$\text{MM CO}_2 = 12 + (16 \times 2) = 44 \text{ [g/mol]} \longrightarrow 1 \text{ mol CO}_2 = 44 \text{ g CO}_2$$

$$\text{MM NaHCO}_3 = 23 + 1 + 12 + (16 \times 3) = 84 \text{ [g/mol]} \longrightarrow 1 \text{ mol NaHCO}_3 = 84 \text{ g NaHCO}_3$$

Ejercicio para reforzar el manejo de relaciones molares

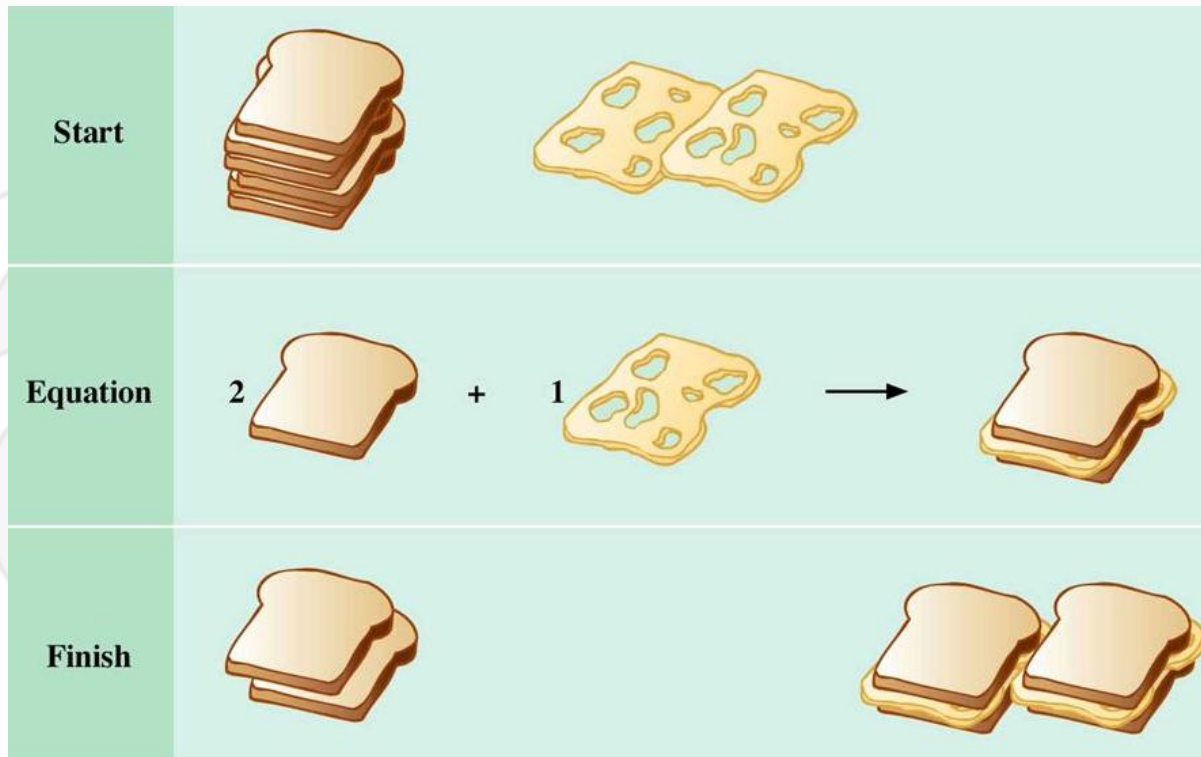
Se puede preparar KClO_4 mediante una serie de reacciones consecutivas. ¿Cuánto Cl_2 se necesita para preparar **100 [g] de KClO_4** con la secuencia siguiente:



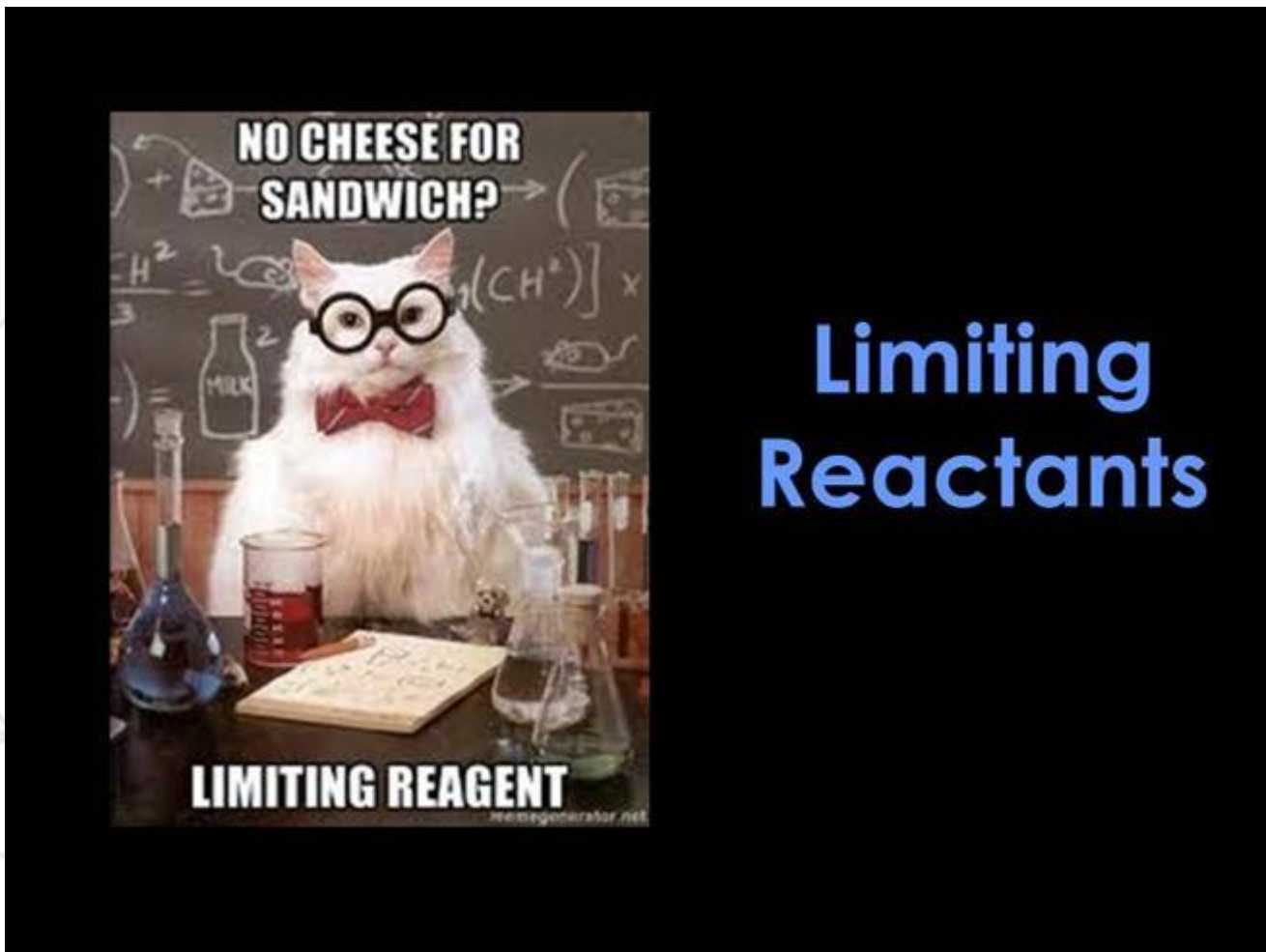
$$100 \text{ g } \cancel{\text{KClO}_4} \left(\frac{1 \cancel{\text{ mol KClO}_4}}{135.55 \cancel{\text{ g KClO}_4}} \right) \left(\frac{4 \cancel{\text{ mol KClO}_3}}{3 \cancel{\text{ mol KClO}_4}} \right) \left(\frac{3 \cancel{\text{ mol KClO}}}{1 \cancel{\text{ mol KClO}_3}} \right) \left(\frac{1 \cancel{\text{ mol Cl}_2}}{1 \cancel{\text{ mol KClO}}} \right) = 2.95 \text{ [mol] Cl}_2$$

$$100 \text{ g } \text{KClO}_4 \left(\frac{1 \text{ mol KClO}_4}{135.55 \text{ g KClO}_4} \right) \left(\frac{4 \text{ mol KClO}_3}{3 \text{ mol KClO}_4} \right) \left(\frac{3 \text{ mol KClO}}{1 \text{ mol KClO}_3} \right) \left(\frac{1 \text{ mol Cl}_2}{1 \text{ mol KClO}} \right) \left(\frac{70.9 \text{ g Cl}_2}{1 \text{ mol Cl}_2} \right) = 209 \text{ [g] Cl}_2$$

Cálculo del rendimiento porcentual de una reacción



- Reactivo limitante
- Reactivo en exceso



Limiting Reactants

Rendimiento porcentual

$$\text{Rendimiento \%} = \frac{\text{Rendimiento experimental o real}}{\text{Rendimiento teórico}} \times 100$$

Las unidades del rendimiento experimental y rendimiento teórico deben ser las mismas:

[g]/[g]
[mol]/[mol]
[L]/[L]



AVOGADRO'S NUMBER

Reactivo limitante y reactivo en exceso (Cuando las cantidades iniciales no corresponden a las estequiométricas)

Una tira de Zn que pesa 2 [g] se coloca en una disolución acuosa que contiene 2.5 [g] de nitrato de plata, lo que causa la siguiente reacción: $\text{Zn}_{(s)} + 2\text{AgNO}_{3(ac)} \rightarrow 2\text{Ag}_{(s)} + \text{Zn}(\text{NO}_3)_{2(ac)}$

- Identifique al reactivo y al reactivo en exceso
- ¿Cuántos [g] de productos se forman?
- ¿Cuántos [g] del reactivo en exceso quedan al término de la reacción?
- Calcule el rendimiento porcentual de Ag, si experimentalmente se obtienen 1.25 [g]



Moles iniciales	0.0306	0.0147	-----	-----
Moles que reaccionan	- 0.00735	- 0.0147	-----	-----
Moles finales	0.02325	0	0.0147	0.00735

Reactivo en
exceso

Reactivo
limitante

Cálculos

Moles iniciales

$$2 \text{ g Zn} \left(\frac{1 \text{ mol Zn}}{65.4 \text{ g Zn}} \right) = 0.0306 \text{ mol Zn}$$

$$2.5 \text{ g AgNO}_3 \left(\frac{1 \text{ mol AgNO}_3}{170 \text{ g AgNO}_3} \right) = 0.0147 \text{ mol AgNO}_3$$

Moles que reaccionan

Para que reaccionen:

$$0.0306 \text{ mol Zn} \left(\frac{2 \text{ mol AgNO}_3}{1 \text{ mol Zn}} \right) = 0.0612 \text{ mol AgNO}_3 > 0.0147 \text{ mol AgNO}_3 \therefore \text{es el reactivo limitante}$$

$$0.0147 \text{ mol AgNO}_3 \left(\frac{1 \text{ mol Zn}}{2 \text{ mol AgNO}_3} \right) = 0.00735 \text{ mol Zn} < 0.0306 \text{ mol Zn} \therefore \text{es el reactivo en exceso}$$

Moles finales

Moles finales de reactivos = moles iniciales – moles que reaccionan

Moles finales de productos: Se calculan en base a las moles que reaccionan de alguno de los reactivos (el resultado es el mismo independientemente del reactivo que se elija).

Moles finales de productos

En base a moles de Zn que reaccionan (0.00735 mol Zn):

$$0.00735 \text{ mol Zn} \left(\frac{2 \text{ mol Ag}}{1 \text{ mol Zn}} \right) = 0.0147 \text{ mol Ag} \left(\frac{108 \text{ g Ag}}{1 \text{ mol Ag}} \right) = 1.59 \text{ g Ag}$$

$$0.00735 \text{ mol Zn} \left(\frac{1 \text{ mol Zn(NO}_3)_2}{1 \text{ mol Zn}} \right) = 0.00735 \text{ mol Zn(NO}_3)_2 \left(\frac{189.4 \text{ g Zn(NO}_3)_2}{1 \text{ mol Zn(NO}_3)_2} \right) \\ = 1.39 \text{ g Zn(NO}_3)_2$$

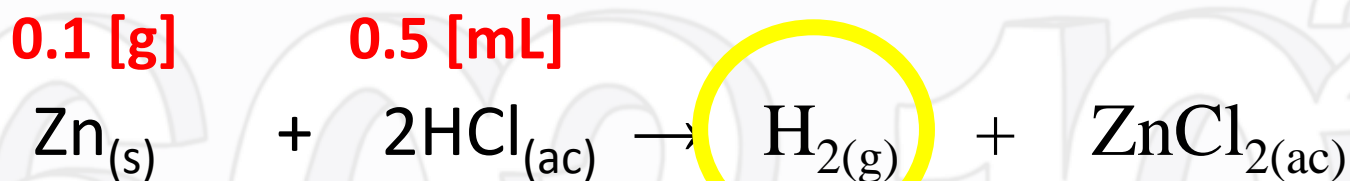
[g] del reactivo en exceso:

$$0.02325 \left(\frac{65.4 \text{ g Zn}}{1 \text{ mol Zn}} \right) = 1.52 \text{ g Zn}$$

Rendimiento porcentual de Ag:

$$R \% \text{ Ag} = \frac{1.25 \text{ [g] Ag}}{1.59 \text{ [g] Ag}} \times 100 = 78.61 \%$$

Reacciones que involucran disoluciones y gases



Revisar:

- Unidades de concentración
- Ley de los gases ideales

Unidades de concentración

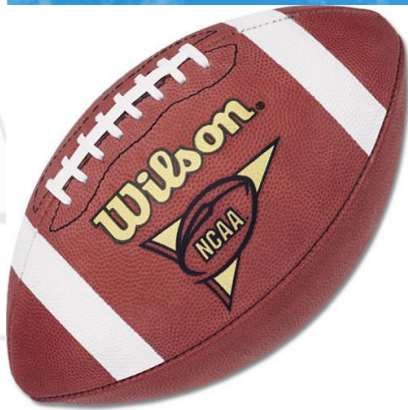
UNIDADES DE CONCENTRACIÓN		
Porcentaje masa/masa $\% \frac{m}{m} = \frac{[g]_{\text{soluto}}}{[g]_{\text{disolución}}} \times 100$	Porcentaje masa/volumen $\% \frac{m}{v} = \frac{[g]_{\text{soluto}}}{[mL]_{\text{disolución}}} \times 100$	Porcentaje volumen/volumen $\% \frac{v}{v} = \frac{[mL]_{\text{soluto}}}{[mL]_{\text{disolución}}} \times 100$
Fracción molar $F_m = \frac{[mol]_{\text{soluto}}}{[mol]_{\text{totales}}}$	Molaridad $M = \frac{[mol]_{\text{soluto}}}{[L]_{\text{disolución}}}$	Molalidad $m = \frac{[mol]_{\text{soluto}}}{[kg]_{\text{disolvente}}}$



LEYES DE LOS GASES

Día caluroso

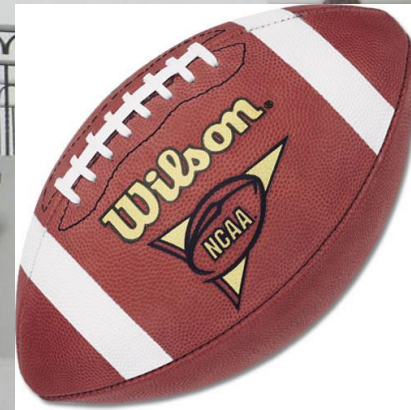
Summer Times - 2
www.SummerTimes.com



LEYES DE LOS GASES



Día frío



Ley de Charles (1746 - 1823)

y

Joseph Gay-Lussac (1778-1850)



Charles



$$V \propto T$$
$$V = kT$$
$$V_1 = kT_1 \quad V_2 = kT_2$$
$$k = V_1/T_1 \quad k = V_2/T_2$$

Igualando:



Gay-Lussa

P y n constantes

$$V_1/T_1 = V_2/T_2$$

LEYES DE LOS GASES

Cambios de presión



Ley de Robert Boyle (1627 - 1691)



$$P \propto 1/V$$

$$P = k(1/V)$$

$$P_1 = k(1/V_1)$$

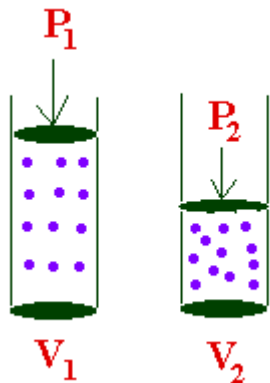
$$P_2 = k(1/V_2)$$

$$k = P_1 V_1$$

$$k = P_2 V_2$$

Igualando:

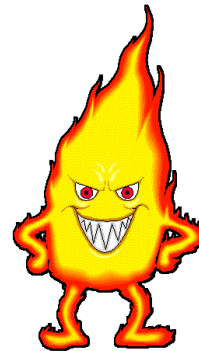
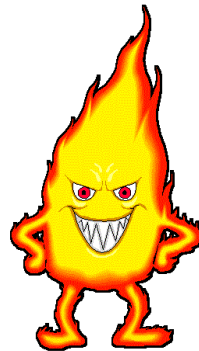
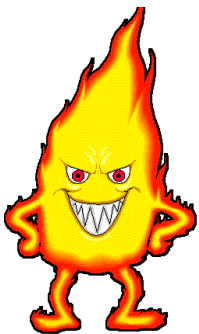
$$P_1 V_1 = P_2 V_2$$



T y n constantes

LEYES DE LOS GASES

Presión en función de la Temperatura



Guillaume Amontons (1663-1705)



$$P \propto T$$

$$P = kT$$

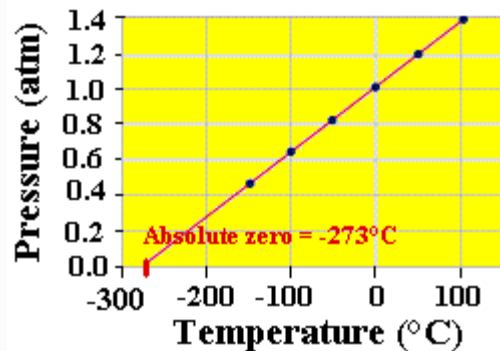
$$P_1 = kT_1$$

$$P_2 = kT_2$$

$$k = P_1/T_1$$

$$k = P_2/T_2$$

Igualando:



$$P_1/T_1 = P_2/T_2$$

V y n constantes

LEYES DE LOS GASES



Volumen y Número de moles

Ley de Amadeo Avogadro (1776-1856)



$$V \propto n$$

$$V = kn$$

$$V_1 = kn_1$$

$$V_2 = kn_2$$

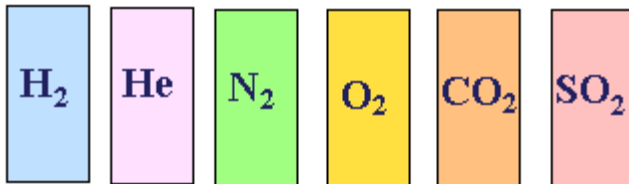
$$k = V_1/n_1$$

$$k = V_2/n_2$$

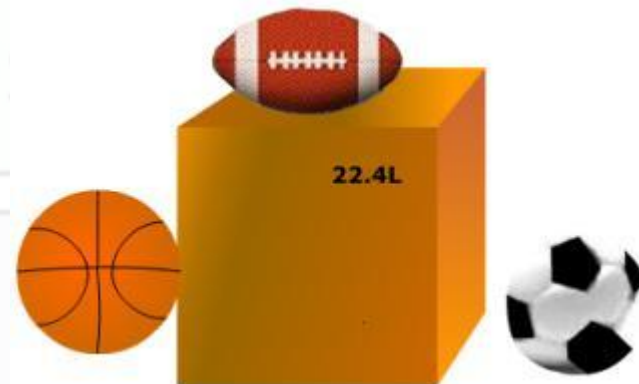
Igualando:

$$V_1/n_1 = V_2/n_2$$

A 0°C y 1 atm, 1 mol de cualquier gas ocupa 22,4 L



T y P constantes

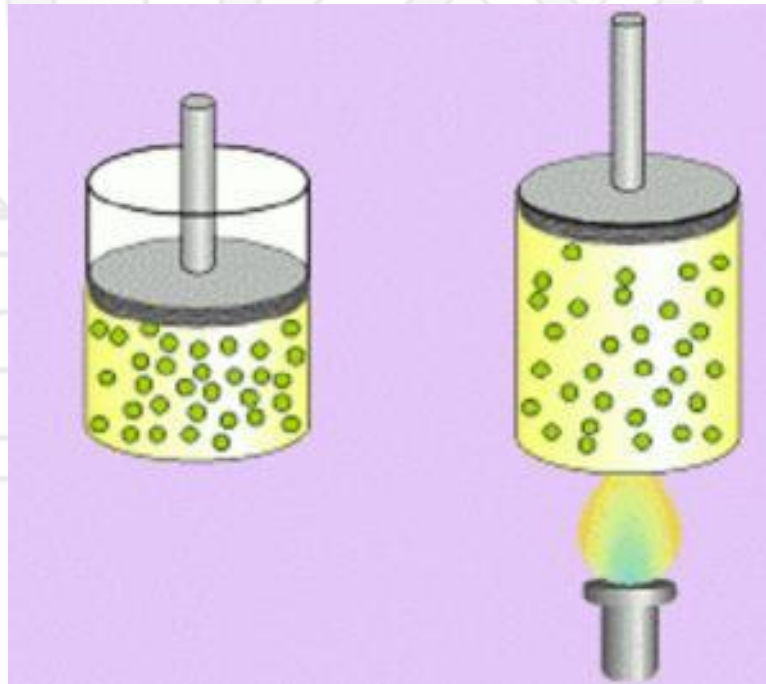


INVOLUCRANDO TODAS LAS VARIABLES:

PRESIÓN

VOLUMEN

TEMPERATURA



Ley de los gases ideales

$$P \propto 1/V \quad \text{ó} \quad V \propto 1/P$$

$$V \propto T$$

$$V \propto n$$

Por lo tanto:

$$V \propto Tn/P$$

$$V = \text{cte.} (Tn/P)$$

$$V = R (Tn/P)$$

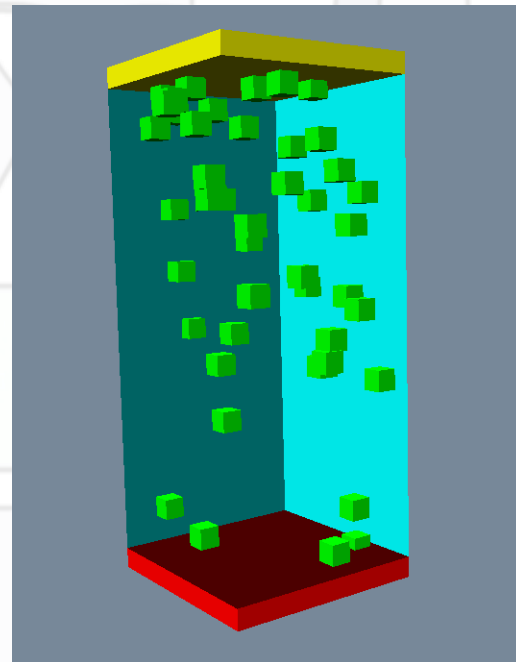
ó

$$P_1 V_1 = nRT_1 \quad P_2 V_2 = nRT_2$$

$$nR = P_1 V_1 / T_1 \quad nR = P_2 V_2 / T_2$$

Igualando:

$$P_1 V_1 / T_1 = P_2 V_2 / T_2$$



$$PV = nRT$$

Ley de John Dalton (1766-1844)

Mezcla de gases



John Dalton

gas A $P_A = \frac{n_A RT}{V}$

gas B $P_B = \frac{n_B RT}{V}$

$$P_T = P_A + P_B$$

$$P_T = \frac{n_A RT}{V} + \frac{n_B RT}{V}$$

$$P_T = \frac{\frac{n_A RT}{V}}{RT(n_A + n_B) / V}$$

$\frac{P_i}{P_T} = \chi_i$ fracción molar del gas i

$$\frac{P_A}{P_T} = \frac{n_A}{n_A + n_B} = \frac{n_A}{n_T}$$

$$\chi_i = \frac{n_i}{n_T}$$

$$P_i = \chi_i P_T$$

$P_{\text{He}} = 1 \text{ atm}$

$P_{\text{Ne}} = 2 \text{ atm}$

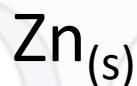
$P_{\text{Ar}} = 3 \text{ atm}$

$P_T = 6 \text{ atm}$

Reacciones que involucran disoluciones y gases

0.1 [g]

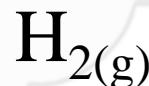
0.5 [mL]



+



→



+



Moles iniciales	1.53×10^{-3}	6.13×10^{-3}		--
Moles que reaccionan	1.53×10^{-3}	3.06×10^{-3}	--	--
Moles finales	0	3.07×10^{-3}	1.53×10^{-3}	1.53×10^{-3}

Rendimiento teórico = 49.05 [mL]
T = 25°C

Disolución de HCl:
 $\rho = 1.19 \text{ [g/mL]}$
 37.6 % en masa

Moles iniciales de HCl

$$0.5 \text{ mL HCl disoln.} \left(\frac{1.19 \text{ g HCl disoln.}}{1 \text{ mL HCl disoln.}} \right) \left(\frac{37.6 \text{ g HCl}}{100 \text{ g HCl disoln.}} \right) \left(\frac{1 \text{ mol HCl}}{36.45 \text{ g HCl}} \right) \\ = 6.13 \times 10^{-3} \text{ mol HCl}$$

Rendimiento teórico de H₂ en volumen

$$V = \frac{nRT}{P} = \frac{(1.53 \times 10^{-3} \text{ mol}) \left(0.08205 \frac{\text{L} \cdot \text{atm}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \right) (298.15 \text{ K})}{0.7631 \text{ atm}} = 0.04905 \text{ [L]} = 49.05 \text{ [mL]}$$

AVOGADRO'S NUMBER



Gracias por su atención

