

CÁLCULOS ESTEQUIOMÉTRICOS

La estequiometría es la parte de la Química que estudia las relaciones entre los compuestos que intervienen en una reacción, reactivos (a la izquierda) y productos (a la derecha). Entre paréntesis podemos expresar la fase o estado de agregación en la que se encuentran.

El primer paso de estos problemas (y fundamental, no olvidar) es ajustar la reacción mediante los adecuados **coeficientes estequiométricos** de manera que el número de átomos de cada elemento sea idéntico a ambos lados de la reacción y así cumpla con la **ley de conservación de la masa** (ley de Lavoisier).



$$1 \text{ mol} \times 56 \text{ g/mol} + 6 \text{ mol} \times 32 \text{ g/mol} \rightarrow 4 \text{ mol} \times 44 \text{ g/mol} + 4 \text{ mol} \times 18 \text{ g/mol}$$

248 g

248 g

Mediante los coeficientes estequiométricos conseguimos que el número de átomos de C(4), de H(8) y de O(12) sea idéntico en ambos lados de la reacción y se cumpla la conservación de la masa.

¿Cómo se interpretan los coeficientes estequiométricos?

Los coeficientes estequiométricos indican las relaciones que existen entre los diferentes compuestos que intervienen en la reacción. De esta manera en la ecuación anterior:

1 mol de C_4H_8 reaccionarán con 6 moles de O_2 para obtener 4 moles de CO_2 y 4 moles de H_2O . Por lo tanto, los coeficientes estequiométricos dan la **relación en moles** de sustancia.

Cálculos con masas. Supongamos que queremos saber cuántos gramos de agua se formarán si se consumen 64 g de oxígeno.

- **Primero:** Pasamos de gramos a moles para poder utilizar la relación estequiométrica:

$$64 \text{ g de } O_2 \cdot \frac{1 \text{ mol de } O_2}{32 \text{ g de } O_2} = 2 \text{ moles de } O_2$$

- **Ahora** utilizamos la relación estequiométrica: Si por cada 6 moles de O_2 se forman 4 moles de agua, si tenemos 2 moles de O_2 , se formarán 1,33 moles de agua. Podemos resolver el problema en forma de factor de conversión, de equivalencia, o mediante una regla de tres.

$$2 \text{ moles de } O_2 \cdot \frac{4 \text{ moles de } H_2O}{6 \text{ moles de } O_2} = 1,33 \text{ moles de } H_2O \cdot \frac{18 \text{ g de } H_2O}{1 \text{ mol de } H_2O} = 24 \text{ g de } H_2O$$

Cálculos con volúmenes. Si las sustancias que intervienen en la reacción están en estado gaseoso, pueden deducirse las relaciones entre los volúmenes o las masas de las sustancias que intervienen en la reacción teniendo en cuenta:

- Si las condiciones son normales, basta recordar la hipótesis de Avogadro y que el volumen molar de cualquier gas en esas condiciones es 22,4 L.
- Si no tenemos condiciones normales, basta aplicar la ecuación del gas ideal para calcular el número de moles de las sustancias que nos hagan falta.

Cálculos con reactivos en disolución: Es frecuente en los procedimientos de laboratorio que las sustancias se encuentren disueltas. En tales casos, para poder realizar los cálculos estequiométricos es necesario conocer la concentración de las disoluciones, lo que permite determinar la masa de reactivo disuelta.

Rendimiento de la reacción

Los cálculos que hacemos a partir de las relaciones estequiométricas, son teóricos y reflejan la cantidad máxima de producto que puede formarse a partir de los reactivos. Sin embargo, en la práctica y por causas diversas, se obtiene una cantidad de producto menor que la esperada y por lo tanto surge la necesidad de indicar la relación existente entre la **cantidad práctica o real** (la que se obtiene experimentalmente) y la **cantidad teórica** (obtenida a partir de los cálculos estequiométricos). La relación entre ambas cantidades es el **rendimiento de la reacción**.

$$R = \frac{\text{Cantidad real}}{\text{Cantidad teórica}} \cdot 100$$

Riqueza o pureza :

Hasta ahora hemos considerado que los reactivos de la reacción eran siempre sustancias puras, circunstancia poco frecuente en la realidad. Por regla general, todas las sustancias presentan un cierto grado de impurezas, detalle que es preciso conocer para enfocar correctamente el problema. Por tanto, a la hora de resolver un caso práctico aplicando los cálculos estequiométricos, nunca debe tomarse la cantidad total de muestra que se da (a no ser que la pureza sea del 100%), sino la parte que corresponde a reactivo puro.

La riqueza, indica la cantidad de reactivo puro que realmente contiene una muestra en tanto por ciento.

$$\text{Riqueza} = \frac{\text{masa de reactivo}}{\text{masa de la muestra}} \cdot 100$$

Así por ejemplo, si nos dicen que tenemos una muestra de caliza de 250 g cuya riqueza en carbonato de calcio es del 80%, hemos de considerar que la cantidad real de carbonato de calcio no es 250 g sino

$$250 \text{ g} \cdot \frac{80 \text{ g de CaCO}_3}{100 \text{ g de muestra}} = 200 \text{ g de CaCO}_3$$

Reactivo limitante y reactivo en exceso

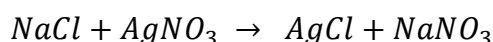
El problema se nos presenta cuando tenemos las cantidades de varios reactivos y existe la probabilidad de que alguno de ellos se consuma antes que otro.

El **reactivo limitante** es aquel que se consume primero en la reacción mientras que sobra cierta cantidad de otros que no tienen con qué reaccionar y quedan en **exceso**.

El reactivo limitante es aquel que debemos utilizar para establecer relaciones estequiométricas fiables ya que es el que pone fin a la reacción.

a) Los reactivos están en la misma relación estequiométrica

Ej: Determina la masa de AgCl obtenida a partir de 100 ml de disolución de AgNO₃ 0,5 M y 100 ml de disolución de NaCl 0,4 M según la reacción:



- Vemos que la reacción ya está ajustada.
- Calculamos los moles de AgNO₃ y NaCl a partir de la relación: $n = M \cdot V_D (l)$, lo cual nos da:

$$n(\text{NaCl}) = 0,1 \cdot 0,4 = 0,04 \text{ moles de NaCl}$$

$$n(\text{AgNO}_3) = 0,1 \cdot 0,5 = 0,05 \text{ moles de AgNO}_3$$

- Al estar en la misma relación estequiométrica (1 mol de NaCl reacciona con 1 mol de AgNO₃) es fácil ver que el reactivo limitante (el que se acaba primero) es el NaCl y por lo tanto es con él con el que debemos calcular la masa de AgCl que se ha formado.
- Calculamos la cantidad de AgCl que se ha producido en la reacción:

$$0,04 \text{ moles de NaCl} \cdot \frac{1 \text{ mol de AgCl}}{1 \text{ mol de NaCl}} \cdot \frac{143,5 \text{ g de AgCl}}{1 \text{ mol de AgCl}} = 5,74 \text{ g de AgCl}$$

- Podemos calcular la masa de AgNO₃ que no reacciona:
0,05 moles iniciales de AgNO₃ – 0,04 moles de AgNO₃ que SÍ reaccionan = 0,01 moles de AgNO₃ EN EXCESO.

$$0,01 \text{ moles de AgNO}_3 \text{ en exceso} \cdot \frac{170 \text{ g de AgNO}_3}{1 \text{ mol de AgNO}_3} = 1,7 \text{ g de AgNO}_3 \text{ en exceso}$$

b) Los reactivos están en diferentes relaciones estequiométricas.

Ej: Se mezclan 20 g de cinc con 200 ml de disolución de HCl 0,6 M desprendiendo ZnCl₂ e hidrógeno.

- Escribimos y ajustamos la reacción: $\text{Zn} + 2\text{HCl} \rightarrow \text{ZnCl}_2 + \text{H}_2$
- Calculamos el número de moles que tenemos de cada reactivo:

$$20 \text{ g de Zn} \cdot \frac{1 \text{ mol de Zn}}{65,4 \text{ g de Zn}} = 0,31 \text{ moles de Zn}$$

$$0,2 \text{ L de disolución de HCl} \cdot 0,6 \text{ M HC} = 0,12 \text{ moles de HCl}$$

- Identificamos el reactivo limitante: según la relación estequiométrica, por cada 2 moles de HCl se consume 1 de Zn (la mitad), luego cuando se consume todo el HCl (0,12 moles) tan sólo se habrán consumido la mitad de Zn ($0,12:2=0,06$ moles) quedando en exceso en resto de Zn no consumido en la reacción: ($0,31-0,06=0,25$ moles de Zn en exceso).
- Luego el reactivo limitante es el HCl que se consume por completo y es el que debemos utilizar para calcular cualquier otra relación estequiométrica.