**TEMA 1: PRINCIPIOS BÁSICOS DE LA QUÍMICA**

Empecemos por definir qué es la Química.

La Química tiene por objeto el estudio de las sustancias y las transformaciones que pueden experimentar, lo que permitirá conocer mejor su estructura, sus mecanismos de reacción, la posibilidad de formación de nuevas sustancias y sus propiedades y aplicaciones.

Para entendernos, la Química se ocupa del estudio de los cambios químicos, que son aquellos en los que las sustancias que toman parte en él, se transforman total o parcialmente en otras nuevas.

La **sustancia pura** o **especie química** es toda clase de materia, con una composición química definida, caracterizada por un conjunto de propiedades que solamente ella posee y que sirven por tanto para identificarla. No se pueden separar en otras formas de materia más sencillas por procedimientos físicos. Son sustancias puras, el oro, la plata, el agua, el cloruro de sodio…

Las **sustancias compuestas** o **compuestos químicos**, se pueden transformar en otras sustancias más sencillas por procedimientos químicos (reacción, corriente eléctrica, calor…).

Por el contrario, las sustancias puras que por los medios químicos usuales no se pueden descomponer en otras más sencillas, son los **elementos** o **sustancias simples.**

Prácticamente la totalidad de las sustancias químicas existentes son compuestas. Actualmente se conocen 110 sustancias simples o elementos, de los cuales son naturales (existen en la naturaleza), 88, son los **elementos naturales**. Los 22 restantes han sido obtenidos por medio de reacciones nucleares, son por lo tanto artificiales o sintéticos.

**Símbolos de los elementos:** Para representar abreviadamente a los elementos utilizamos su símbolo químico. La utilización de símbolos químicos se remonta a la época medieval aunque eran muy artificiosos. En la actualidad se ha adoptado el criterio, aprobado mediante convenios internacionales, de emplear como símbolos de los elementos la primera letra (mayúscula) o, en caso de coincidencia, la primera mayúscula y la segunda minúscula de su nombre latino.

Las sustancias compuestas o **compuestos** químicos se representa mediante su **fórmula** química.

1. **LEYES EXPERIMENTALES DE LAS TRANSFORMACIONES QUÍMICAS: Leyes ponderales y volumétricas**

En el estudio experimental de las transformaciones químicas se han observado una serie de regularidades que, enunciadas en forma de leyes entre los años 1785 y 1808, con contribuido de forma muy destacada al desarrollo histórico de la química. Estas leyes son las **leyes ponderales o volumétricas** según hagan referencia a las masas de las sustancias, o a los volúmenes de las sustancias gaseosas que intervienenen la reacción.

1. **Ley de Lavoisier o de conservación de la masa (1785)**

La masa total de las sustancias que intervienen en una reacción química permanece constante y, por tanto, la suma de las masas de los reactivos debe ser igual a la suma de las masas de los productos de la reacción.

*La ecuación de Einstein E=mc2 pone de manifiesto que una variación de masa, implica una variación de energía y viceversa. Esto trae como consecuencia que la ley de Lavoisier no es rigurosamente cierta. Sin embargo, en las reacciones químicas la cantidad de energía puesta en juego equivale a una cantidad tan insignificante de masa, que resulta inapreciable incluso para las mejores balanzas, pudiendo aceptarse la validez de la ley de conservación de la masa.*

1. **Ley de las proporciones definidas o ley de Proust (1799)**

Cuando dos o más elementos se combinan para dar un compuesto, lo hacen siempre en la misma relación en peso constante.

*La ley de Proust fue muy combatida por el químico Berthollet, que sostenía la idea de que la composición cuantitativa de los compuestos dependía de su forma de preparación. Aunque Proust demostró que las sustancias descritas por Berthollet eran mezclas o disoluciones, hoy se sabe que existen algunos compuestos que a causa de deformaciones en su red cristalina no cumplen la ley de las proporciones definidas. Estos compuestos se llaman* ***bertólidos,*** *en contraposición a los* ***daltónidos****, cuya composición es fija y definida.*

1. **Ley de las proporciones múltiples o de Dalton (1803)**

Las cantidades de un determinado elemento que se combinan con una misma cantidad de otro, para formar en cada caso un compuesto distinto, están en la relación de números enteros y sencillos.

1. **Ley de los volúmenes de combinación o de Gay-Lussac (1808)**

Los volúmenes de todas las sustancias gaseosas que intervienen en una reacción química (**medidos en las mismas condiciones de presión y temperatura)** están entre sí en una relación constante y sencilla de números enteros.

**La ley de Gay-Lussac sólo es aplicable apara los volúmenes de sustancias gaseosas; no para sólidos y líquidos.**

1. **TEORÍA ATÓMICA DE DALTON (1803)**

Las leyes ponderales de las transformaciones químicas encontraron su justificación teórica en la teoría atómica formulada por Dalton. Las hipótesis fundamentales de dicha teoría, cuyos antecedentes se remontan a los filósofos griegos Leucipo de Mileto y Demócrito de Abdera, son las siguientes:

1. Toda la materia está constituida por pequeñas partículas, indivisibles e inalterables, llamadas átomos.
2. Los átomos de un mismo elemento son idénticos en masa y todas sus propiedades.
3. Los átomos de elementos distintos, tienen masa y propiedades diferentes.
4. Los compuestos se forman por la unión de átomos de los correspondientes elementos en una relación numérica sencilla.
5. Los “átomos” de un compuesto determinado son idénticos en masa y en todas las demás propiedades.

*Estos “átomos” recibirían más tarde el nombre de moléculas.*

1. En una reacción química, los átomos ni se crean ni se destruyen, sólo se reordenan.

Aunque hoy sabemos que los átomos no son indivisibles y que existen átomos de un mismo elemento que difieren en masa (isótopos), la experiencia ha puesto de relieve que la teoría de Dalton es un modelo correcto que permite interpretar adecuadamente las leyes ponderales de las transformaciones químicas.

1. **HIPÓTESIS DE AVOGADRO (1811)**

La teoría atómica de Dalton se mostraba ineficaz para explicar la ley de los volúmenes de combinación de Gay-Lussac, pues Dalton admitía erróneamente la existencia de una ley de conservación de los volúmenes en las reacciones entre sustancias gaseosas. Fue Amadeo Avogadro, quien en 1811 logró reconciliar la teoría atómica y las experiencias de Gay-Lussac formulando las dos hipótesis siguientes.

1. Las últimas partículas integrantes de los gases no son átomos, sino moléculas constituidas por átomos.
2. Volúmenes iguales de gases diferentes, medidos en las mismas condiciones de presión y temperatura, contienen siempre el mismo número de moléculas.

El razonamiento de Avogadro fue el que sigue: si los gases están constituidos por moléculas, éstas han de reaccionar entre sí en una relación de números enteros sencillos. Como esto mismo es lo que ocurre con los volúmenes, ha de existir forzosamente una relación directa entre dichos volúmenes y el número de moléculas.

Además de las hipótesis mencionadas, Avogadro tuvo que admitir que las moléculas de muchos gases elementales (oxígeno, hidrógeno, niktrógeno, cloro, azufre…) eran diatómicas.

La hipótesis de Avogadro establecía una clara distinción entre átomos y moléculas, a la vez que permitía la determinación correcta de sus pesos relativos, sin embargo no fue admitida por sus contemporáneos. Hubo que esperar hasta 1860 para que la comunidad científica tuviera una idea exacta de su significado. A partir de entonces la hipótesis de Avogadro adquirió la categoría de ley.

1. **ÁTOMOS Y MOLÉCULAS**

El concepto de átomo, como partícula fundamental de la materia, surgió inmediatamente de la teoría de Dalton. Por el contrario, el concepto de molécula, partícula constituida por átomos, se debe como hemos visto a Avogadro.

Las moléculas son las agrupaciones más pequeñas de átomos que conservan las propiedades características de una sustancia

* Las sustancias simples, o elementos químicos, están formados por átomos de la misma clase. Sus moléculas, si existen, son **homoatómicas**.
* Las sustancias compuestas, por el contrario, están formadas por átomos diferentes, serán **heteroatómicas.**

*No todas las sustancias están formadas por moléculas. Así, por ejemplo, en los compuestos iónicos, no existen moléculas, sino redes cristalinas integradas por un número indefinido de iones. Lo mismo puede decirse de los metales y de los llamados sólidos atómicos (diamante, dióxido de silicio…), constituidos por un número muy elevado de átomos neutros unidos entre sí también en forma de red.*

De igual forma que los símbolos constituyen la representación abreviada de los elementos o de los átomos de esos elementos, la representación abreviada de un compuesto es su fórmula química.

Las fórmulas se establecen escribiendo los símbolos de los elementos constituyentes de la sustancia, afectados cada uno de un subíndice que indica el número de átomos del elemento presentes en la molécula **(fórmula molecular)**. En el caso de los compuestos iónicos, que no están formados por moléculas, la fórmula expresa la proporción mínima entre los átomos o iones constituyentes que garantice la neutralidad eléctrica (**fórmula empírica)**.

**Unidad de masa atómica:** Dada la masa tan insignificante de los átomos y moléculas, se han establecido unas unidades de medida más adecuadas que las tradicionales.

En agosto de 1961, la Comisión Internacional de Pesos Atómicos acordó por unanimidad, definir una escala de masas atómicas tomando como referencia el isótopo C-12, a cuya masa se le asignó el valor exacto de 12 unidades. Según lo anterior:

La unidad de masa atómica (uma o u) es la doceava parte de la masa de un átomo de C-12 ; $1 u=1,66∙10^{-27}kg$

**Masa atómica de un elemento**: Indica el número de veces que dicha masa es mayor que la unidad de masa atómica. Es la masa que aparece en la tabla periódica y no debe confundirse con el número másico A, que indica el número de protones y neutrones que hay en el núcleo de un átomo y es necesariamente un número entero. La masa atómica, puede ser decimal (normalmente lo es), y corresponde a la media ponderada de las masas de todos los isótopos del elemento.

**Masa molecular:** Suma de las masas atómicas de los elementos que forman la molécula.

**Mol:** En Química trabajamos con partículas como átomos, moléculas, electrones, iones…de tamaño y masa muy pequeños y que intervienen siempre en un número muy elevado. Por ello resulta útil agrupar estas partículas en conjuntos muy grandes que correspondan al mismo número de entidades. Por ello se define el mol.

El mol es la unidad de cantidad de sustancia del sistema internacional y se define, como la cantidad de sustancia de un sistema que contiene tantas entidades elementales como átomos hay en 12 g de C-12. Estas entidades elementales pueden ser átomos, moléculas, iones o electrones y deben ser especificadas.

El número de átomos existentes en 12 g de C-12, y por lo tanto el número de entidades presentes en 1 mol de cualquier sustancia se conoce con el nombre de **número de Avogadro.**

Su valor es : $N\_{o}=6,022∙10^{23}$

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Compuestos molecularesNH3, H2O, CH4… | Entidad elemental:molécula | 1 mol del compuesto contiene $6,022∙10^{23}$ moléculas del compuesto |
| Compuestos metálicosAu, Ag, Cu, Fe… | Entidad elemental: átomo | 1 mol del metal contiene $6,022∙10^{23}$ átomos de la sustancia |
| Compuestos iónicosNaCl, KBr,… | Entidad elemental:Unidad fórmula | 1 mol del compuesto iónico contiene$6,022∙10^{23}$ unidades fórmula del compuesto  |

**Masa molar:** Es la masa de 1 mol de compuesto expresada en g/mol. Su valor numérico coincide con el de la masa molecular del compuesto con otras unidades.

Masa molecular NH3 = 17 uma

Masa molar NH3 = 17 g/mol

 **Cálculo del número de moles de una sustancia**

 **Ej:** Calculemos cuántos moles hay en 90 g de agua.

$$90 g H\_{2}O∙\frac{1 mol H\_{2}O}{18 g H\_{2}O}=5 moles de H\_{2}O$$

 **Cálculo del número de moléculas de agua en 90 g de sustancia.**

 Ya sabemos que en 90 g de agua hay 5 moles de sustancia:

$$5 moles de H\_{2}O∙\frac{6,022∙10^{23}moléculas de H\_{2}O}{1 mol de H\_{2}O}=3,011∙10^{24}moléculas de agua$$

**Cálculo del número de átomos.**

1. Átomos de H

$3,011∙10^{24}moléculas de H\_{2}O∙\frac{2 átomos de H}{1 molécula de agua}=6,022∙10^{24}$átomos de H

1. Átomos O:
2. $3,011∙10^{24}moléculas de H\_{2}O∙\frac{1 átomos de O}{1 molécula de agua}=3.011∙10^{24}$átomos de O

Si la sustancia es metálica, a partir del número de moles podemos calcular directamente el número de átomos.

**Cálculo de la composición centesimal de una sustancia.**

Conocida la fórmula de una sustancia, podemos determinar el porcentaje en peso en que interviene cada elemento en la constitución de la sustancia mediante un sencillo cálculo de tantos por ciento.

$$\% \left(X\_{i}\right)=\frac{N\_{i}∙A\_{i}}{M}∙100$$

Siendo, Ni, el número de átomos del elemento i en la fórmula del compuesto. Ai, la masa atómica de ese elemento y M la masa molecular del compuesto.

**Deducción de fórmulas a partir de la composición centesimal.**

1. Dividimos cada porcentaje entre la masa atómica del elemento. Con ello hemos calculado el número de moles de ese elemento en 100 g de compuesto.
2. Como cada mol tiene la misma cantidad de átomos, la relación es la misma entre moles que entre átomos.
3. Dividimos los números obtenidos por la cantidad más pequeña para obtener la relación más pequeña posible que dé las cantidades de átomos en la molécula.
4. Esa relación me da la **fórmula empírica.**
5. **Para calcular la fórmula molecular a partir de la empírica,**  necesito conocer la masa molar de la sustancia. Calculamos la relación entre la masa molar y la empírica. La cantidad obtenida me indica cuántas veces tengo que repetir la fórmula empírica para obtener la molecular.
6. **ECUACIONES CON GASES**
7. **Volumen molar.** Como hemos visto, un mol de cualquier sustancia contiene N0  partículas que serán átomos, moléculas, iones…dependiendo de la sustancia de que se trate. En el caso de un gas, ya hemos visto también que estas partículas son siempre moléculas (hipótesis de Avogadro). Además de dicha hipótesis, se deduce que un determinado número de moléculas de un gas, en idénticas condiciones de presión y temperatura, ocupa siempre el mismo volumen. Por lo tanto: **1 mol de cualquier gas, en las mismas condiciones de presión y temperatura, ocupará siempre el mismo volumen.** Este volumen se llama **volumen molar** y en condiciones normales (1 atm y 0º C/273 K) tiene un valor de 22,4 litros.
8. **Ecuación de los gases ideales**

Cualquier gas se comporta como un gas ideal a bajas presiones y temperaturas moderadas. Un gas ideal es aquel en el que no tenemos en cuenta las interacciones entre las partículas. Un gas tiende a ocupar totalmente el volumen del recipiente que lo contiene, por lo que el volumen de gas coincide con el volumen del recipiente.

La ecuación de estado del gas ideal, relaciona las variables presión, volumen, temperatura y cantidad de sustancia (número de moles), que definen al gas.

P=presión (atm) $\rightarrow $ 1 atm=760 mmHg

V=volumen (L)

n= número de moles

T=temperatura (K)$\rightarrow $ $0℃=273$

R=constante de los gases $\rightarrow 0,082 atm∙L∙K^{-1}∙mol^{-1}$

$$P∙V=n∙R∙T$$

**Aplicaciones de la ecuación de estado de los gases ideales**

**b.1. Determinación de masas molares.** Si tenemos a gramos de una sustancia de masa molar M, tenemos que $n=\frac{a}{M}$ , por lo tanto: $M=\frac{aRT}{PV}$

**b.2. Determinación de la densidad del gas.** $ρ=\frac{a}{V} \rightarrow ρ=\frac{PM}{RT}$

**c. Ley de Dalton de las presiones parciales**: Cuando se mezclan varios gases que no reaccionan químicamente entre sí, cada uno de ellos se comporta como si estuviera solo en el recipiente que los contiene.

A la presión que cada gas ejerce individualmente se le denomina **presión parcial** de dicho gas. El estudio de las presiones parciales llevado a cabo por Dalton condujo al establecimiento de la siguiente ley:

Cada componente de una mezcla gaseosa ejerce una presión parcial igual a la que ejercería si ocupase él solo todo el volumen de la mezcla, y la presión total es la suma de las presiones parciales de todos los componentes.

$$P\_{T}=\sum\_{}^{}P\_{i} ; P\_{i}=X\_{i}∙P\_{T}$$

1. **DISOLUCIONES**

Muchas veces los reactivos de una reacción se encuentran disueltos por lo que es fundamental tener claros los siguientes conceptos.

* Si disponemos de una disolución de, por ejemplo H2SO4, los componentes de la disolución son: soluto: H2SO4 ; disolvente: agua
* **Concentración de una disolución:** es la cantidad de soluto que existe en una determinada cantidad de disolvente o de disolución. Las disoluciones pueden ser diluidas (cuando tienen poco soluto), Podemos expresarla en distintas unidades:

Molaridad (concentración molar)=$\frac{moles de soluto}{Litros disolución }$ M=moles/L

 % masa =$\frac{masa soluto}{masa disolución}∙100$

 Concentración en g/L=$\frac{gramos de soluto}{litros de disolución}$

Densidad ($ρ)=\frac{masa disolución}{volumen de disolución}$

 Fracción molar (X):

 $X\_{H\_{2}SO\_{4}}=\frac{moles de H\_{2}SO\_{4} }{moles deH\_{2}SO\_{4}+ moles de agua }$ $X\_{H\_{2O}}=\frac{moles de H\_{2}O}{moles deH\_{2}SO\_{4}+ moles de agua }$

 $($ $X\_{H\_{2}SO\_{4}}$+ $X\_{H\_{2O}}$)