

ESTEQUIOMETRÍA.

La **ESTEQUIOMETRÍA** es la parte de la química que estudia las relaciones entre las cantidades (masas volúmenes) de las diferentes sustancias (reactivos o productos) que intervienen en una reacción química. Los *cálculos estequiométricos* son, por tanto, todas aquellas operaciones encaminadas a determinar las masas o volúmenes con los que participan las sustancias en una determinada reacción química.

Ya se había indicado que a los símbolos de los elementos o fórmulas de los compuestos se le puede dar un significado cuantitativo, al representar con ellos a una cantidad determinada de dicha sustancia (un mol).

Por ello, si en una ecuación química se representan los reactivos y productos por sus símbolos o fórmulas, obtenemos la **ECUACIÓN QUÍMICA** correspondiente a la reacción considerada, ecuación ésta que describe la reacción tanto desde el punto de vista cualitativo (indica qué sustancias intervienen) como desde el punto de vista cuantitativo (indica las cantidades de cada sustancia que participa en este proceso químico), pero para ello es necesario "**balancearla o ajustarla**", es decir, **colocar un coeficiente delante de la fórmula o símbolo para que exista el mismo número de átomos de cada elemento a cada lado**.

Estas ecuaciones químicas "estequiométricas", es decir ajustadas, simplemente nos indican las cantidades de las sustancias que intervienen en el proceso, pero no nos dan ningún tipo de información de cómo se producen las reacciones químicas a las que representan.

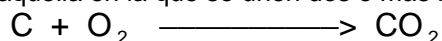
Cuando están escritas correctamente (balanceadas o ajustadas) pueden utilizarse para determinar las cantidades de las sustancias que intervienen en el proceso; pero para poder utilizarlas es necesario que estén ajustadas, por ello vamos a ver primero cómo se ajustan las reacciones y después veremos cómo se pueden utilizar para realizar en ellas los cálculos estequiométricos.

TIPOS DE REACCIONES QUÍMICAS

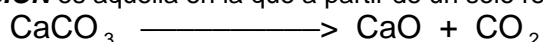
Las reacciones químicas pueden clasificarse en diversos grupos, de acuerdo con la propiedad de las mismas que se tenga en cuenta, así tenemos:

a) Atendiendo a cómo se intercambien los átomos entre los diferentes reactivos:

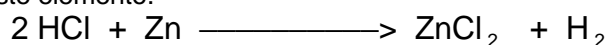
1) **REACCIÓN DE COMBINACIÓN** es aquella en la que se unen dos o más reactivos para dar un solo producto:



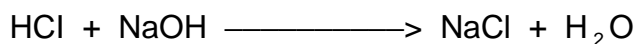
2) **REACCIÓN DE DESCOMPOSICIÓN** es aquella en la que a partir de un solo reactivo se obtienen varios productos:



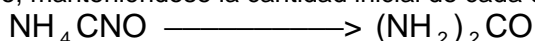
3) **REACCIÓN DE SUSTITUCIÓN SENCILLA** es aquella en la que un elemento sustituye a otro que forma parte de un compuesto, liberándose este elemento.



4) **REACCIÓN DE DOBLE SUSTITUCIÓN** es aquella en la que dos compuestos intercambian algunos de sus elementos:

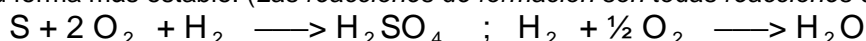


5) **REACCIÓN DE CAMBIO ISOMÉRICO O REAGRUPAMIENTO INTERNO**: Es la transformación de un compuesto en otro, manteniéndose la cantidad inicial de cada uno de los elementos:

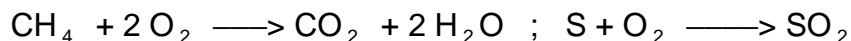


b) Atendiendo al tipo de proceso químico que tenga lugar:

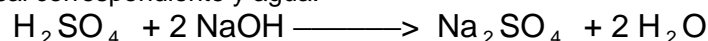
1) **REACCIÓN DE FORMACIÓN**: es aquella en la que se obtiene un mol de un compuesto a partir de sus elementos componentes en su forma más estable. (Las reacciones de formación son todas reacciones de combinación):



2) **REACCIÓN DE COMBUSTIÓN** es aquella en la que un compuesto reacciona con el oxígeno (se quema), obteniéndose los correspondientes óxidos. (Si se quema un compuesto orgánico se forman siempre agua y óxido de carbono(IV), ya que está compuesto por carbono e hidrógeno)



- 3) **REACCIÓN DE NEUTRALIZACIÓN:** es aquella en la reaccionan un ácido con una base (hidróxido), obteniéndose siempre la sal correspondiente y agua:



- 4) **REACCIÓN DE OXIDACIÓN-REDUCCIÓN (REDOX)** es aquella en la que cambia el número de oxidación de algunos de los elementos que intervienen en ella:



(cambia el yodo (pasa de "0" a "-5") y el nitrógeno (pasa de "+5" a "+4"))

c) Atendiendo al intercambio de energía que tenga lugar:

- 1) **REACCIÓN EXOTÉRMICA:** Es aquella en las que se produce un desprendimiento de energía en forma de calor.
- 2) **REACCIÓN ENDOTÉRMICA:** es aquella en la que es necesario suministrar calor a los reactivos para que se produzcan. (Absorben energía).

AJUSTE DE LAS ECUACIONES QUÍMICAS

El ajuste de una ecuación química incluye todos aquellos pasos y/o cálculos necesarios para conseguir que exista el mismo nº de átomos de cada elemento en ambos miembros de la ecuación química: reactivos y productos.

Una ecuación química completa y balanceada, además de permitirnos conocer cuales son los reactivos y cuales los productos, nos indica las cantidades relativas de los mismos que participan en la reacción, cantidades que pueden expresarse en términos de moléculas, moles, gramos e incluso unidades de volumen si se trata de gases.

Así, de la reacción de combustión del butano: $2 \text{CH}_4(\text{g}) + 2 \text{O}_2(\text{g}) \longrightarrow \text{CO}_2(\text{g}) + 2 \text{H}_2\text{O}(\text{l})$; $\Delta H = - 890 \text{ KJ}$ podemos obtener la siguiente información:

- 1- Reactivos y productos: el metano gas reacciona con el oxígeno, también gas, para formar dióxido de carbono gaseoso y agua líquida, desprendiéndose calor en el proceso.
- 2- Cantidades que intervienen: Se produce la reacción entre un mol de metano ($12 + 2 \cdot 1 = 16$ gramos = 22,4 litros en C.N.) con 2 moles de oxígeno ($2 \cdot 32 = 64 \text{ g} = 2 \cdot 22,4 = 44,8$ litros en C.N.) originándose 1 mol de dióxido de carbono ($12 + 16 \cdot 2 = 44$ gramos = 22,4 litros en C.N.), 2 moles de agua líquida ($1 \cdot 2 + 16 = 18$ gramos) a la vez que se desprenden 890 Kjulios en el proceso.

Por tanto, es necesario ajustar todas las ecuaciones químicas antes de proceder a realizar cualquier tipo de cálculo en ellas.

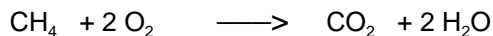
Para ajustar estas reacciones, pueden utilizarse varios métodos generales, que son:

- Ajuste "a ojo", colocando aleatoriamente los coeficientes hasta conseguir el ajuste. Es útil y rápido en ecuaciones sencillas.
 - Ajuste por el "método algebraico o de los coeficientes", basado en la aplicación de un balance de materia a cada uno de los elementos que intervienen en el proceso químico.
 - Ajuste por métodos de oxidación reducción (redox): método del **cambio de valencia y Método del ion-electrón**, basados en la igualación del número de electrones intercambiados entre los reactivos. El estudio de estos métodos queda para el momento que se aborde el estudio de los procesos redox.
- **Ajuste de reacciones "a ojo"** :Útil para procesos sencillos, tales como
- a) Reacciones ácido-base, en las que deben colocarse unos coeficientes tales que nos den el mismo número de H que de OH:

$$\text{H}_2\text{SO}_4 + \text{Al}(\text{OH})_3 \longrightarrow \text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 + \text{H}_2\text{O}$$
 donde hay 3 OH y 2 H, por lo que deben colocarse 6 de cada uno (el mínimo común múltiplo de ambos) ajustando después los demás coeficientes, por lo que nos quedará:

$$3 \text{H}_2\text{SO}_4 + 2 \text{Al}(\text{OH})_3 \longrightarrow \text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 + 6 \text{H}_2\text{O}$$
 - b) Reacciones de combustión: en la que un compuesto se combina con oxígeno para dar los óxidos correspondientes a todos los elementos que lo componen:

$$\text{CH}_4 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$$
 en las que deben igualarse primero los elementos formadores de óxidos dejando siempre para el final el Oxígeno:



- Ajuste por el “método algebraico o de los coeficientes”.

Este método se basa en la aplicación de un balance de materia para todos y cada uno de los elementos que intervienen en el proceso. En él, se colocan unos coeficientes delante de cada uno de los reactivos y productos tales que hagan que el número de átomos de cada elemento en los reactivos y productos sea el mismo.

Para aplicarlo correctamente hemos de seguir los pasos siguientes:

- 1 - Se escriben correctamente las fórmulas de los reactivos y productos que intervienen en la reacción.
- 2 - Se coloca delante de cada símbolo o fórmula un coeficiente: *a, b, c, d, ...*
- 3 - Teniendo en cuenta que el número de átomos de cada elemento ha de ser el mismo a ambos lados, se establece una ecuación para cada uno de los elementos que intervienen en el proceso, igualando el número de átomos de cada uno que haya a ambos lados de la ecuación.
- 4 - Normalmente aparecerán más incógnitas que ecuaciones, por lo que le asigna un valor a uno de los coeficientes (puede darse cualquier valor a cualquier coeficiente) y se resuelve después el sistema.
- 5 - Si las soluciones obtenidas son números fraccionarios, se multiplican todos ellos por un número tal que los convierta en números enteros.
- 6 - Se sustituyen los valores obtenidos en la ecuación (o reacción) química dada, con lo que tendremos ya la ecuación estequiométrica que representa el proceso.

EJEMPLO:

- El ácido nítrico reacciona con el cobre, obteniéndose nitrato de cobre(II), óxido de nitrógeno(IV) y agua. Escribir y ajustar la ecuación química correspondiente.

SOLUCIÓN

- 1- Se escriben las fórmulas y símbolos de las sustancias que intervienen y se le coloca un coeficiente delante de cada una de ellas:



- 2- Se establece una ecuación para cada uno de los elementos:

$$\begin{aligned} \text{H} &\Rightarrow a = 2 \cdot e \quad (\text{Hay 1 H en cada una de las "a" moles de ácido nítrico y 2 H en cada una de las "e" moles de agua}) \\ \text{N} &\Rightarrow a = 2 \cdot c + d \\ \text{O} &\Rightarrow 3 \cdot a = 6 \cdot c + 2 \cdot d + e \\ \text{Cu} &\Rightarrow b = c \end{aligned}$$

- 3- Como hay cinco incógnitas y solamente cuatro ecuaciones, le asignamos un valor cualquiera a una de las incógnitas, por ejemplo, $a = 2$; con ello, al sustituir a por el valor que le hemos asignado, el sistema anterior nos quedará:

$$\begin{aligned} \text{H} &\Rightarrow 2 = 2 \cdot e \quad \dots\dots\dots \text{de la cual deducimos que } e = 1 \\ \text{N} &\Rightarrow 2 = 2 \cdot c + d \\ \text{O} &\Rightarrow 3 \cdot 2 = 6 \cdot c + 2 \cdot d + e \\ \text{Cu} &\Rightarrow b = c \end{aligned}$$

y así:

$$\begin{aligned} \text{N} &\Rightarrow 2 = 2 \cdot c + d \quad \dots\dots\dots \text{de donde deducimos que: } d = 2 - 2 \cdot c \\ \text{O} &\Rightarrow 6 = 6 \cdot c + 2 \cdot d + 1 \Rightarrow 6 = 6 \cdot c + 2 \cdot (2 - 2 \cdot c) + 1 \\ \text{Cu} &\Rightarrow b = c \end{aligned}$$

$$6 = 6 \cdot c + 4 - 4 \cdot c + 1; \quad 6 - 4 - 1 = 2 \cdot c \quad \dots\dots\dots \text{y de aquí, deducimos que: } c = \frac{1}{2}$$

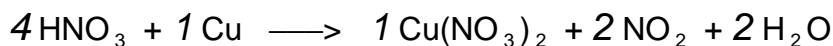
por lo que como $b = c = \frac{1}{2}$ y $d = 2 - 2 \cdot c = 2 - 2 \cdot \frac{1}{2} = 2 - 1 = 1$,

resultarán las siguientes soluciones: $a = 2$; $b = \frac{1}{2}$; $c = \frac{1}{2}$; $d = 1$ y $e = 1$

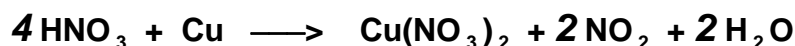
y para que todos los coeficientes sean números enteros, se multiplican por dos, con lo que nos quedarán:

$$\mathbf{a = 4 ; b = 1 ; c = 1 ; d = 2 \text{ y } e = 2}$$

y al sustituirlos en la ecuación, esta nos quedará ajustada de la forma siguiente:



y puesto que pueden omitirse los coeficientes 1, tendremos:



TIPOS DE PROBLEMAS DE ESTEQUIOMETRÍA

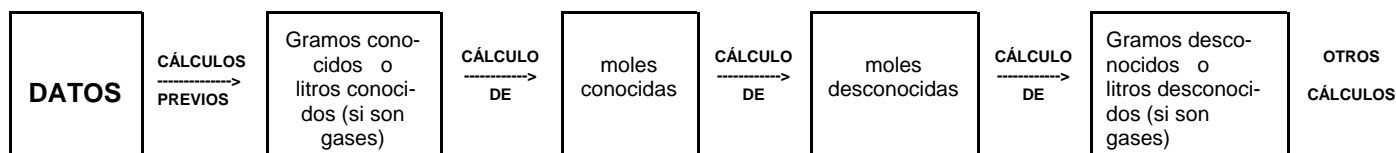
Los cálculos a realizar en cualquier problema de estequiometría pueden ser:

- Cálculos masa-masa
- Cálculos masa - volumen o volumen - masa
- Cálculos volumen - volumen

A partir de la información que se obtiene de la ecuación química balanceada (ajustada) podemos realizar cualquier cálculo sin mas que relacionar las cantidades de las sustancias conocidas con aquellas que hemos de calcular.

Es útil y sencillo realizar los cálculos en moles ya que el número de moles de cada reactivo o producto que intervienen en la reacción balanceada coincide con el coeficiente que afecta a ese compuesto.

Así, los pasos generales a seguir serían los representados en el siguiente esquema:



Desde los datos que nos faciliten: gramos de reactivos o productos, cantidades de disoluciones de reactivos o productos, etc, se determinan los gramos de la sustancia (reactivo o producto) que se conocen para, después, determinar su número de moles (a veces este cálculo del número de moles puede hacerse directamente desde los datos iniciales).

Con estos datos se puede determinar el número de moles de cualquier otra sustancia que intervenga en la reacción ya sea reactivo o producto.

Así, si tomamos como ejemplo la ecuación química ajustada del proceso del ejemplo anterior:



en ella, tenemos la siguiente información:

- 1) Los reactivos son el ácido nítrico: **HNO₃** y el cobre: **Cu**
- 2) Los productos de la reacción son el nitrato de cobre(II): **Cu(NO₃)₂**; el óxido de nitrógeno(IV): **NO₂** y el agua: **H₂O**
- 3) Cada átomo de cobre se combina con cuatro moléculas de ácido nítrico y se forman: una molécula de nitrato de cobre(II), dos moléculas de óxido de nitrógeno(IV) y otras dos moléculas de agua.
- 4) También podemos decir, que cada mol de cobre se combina con cuatro moles de ácido nítrico y se forman: un mol de nitrato de cobre(II), dos moles de óxido de nitrógeno(IV) y otras dos moles de agua.
- 5) Puesto que la masa en gramos de cada mol de sustancia coincide numéricamente con su peso molecular, podemos decir también que cada 63,5 gramos de cobre (su peso atómico) se combina con (63x4) = 252 gramos de ácido nítrico (la masa de cuatro moles) y se forman: 187,5 gramos de nitrato de cobre(II), (46x2) = 92 gramos de óxido de nitrógeno(IV) y (18x2)= 36 gramos de agua.
- 6) Por tanto, si no se dispone de esas cantidades exactas, las cantidades de cada una de las sustancias que intervendrán en este proceso serán proporcionales a ellas, pudiendo realizarse los cálculos aplicando una simple proporción (regla de tres).

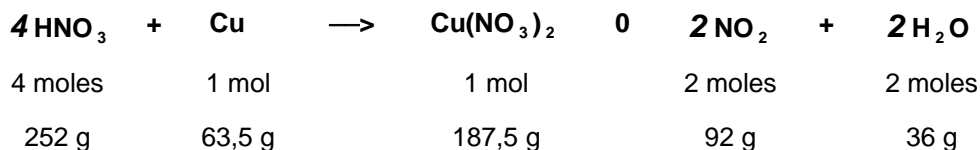
EJEMPLO:

- Determinar la cantidad una disolución 0,5 Molar de ácido nítrico que será necesaria para reaccionar completamente

con 12,7 gramos de cobre. ¿Qué cantidades de nitrato de cobre(II), óxido de nitrógeno(IV) y agua se obtendrán en el proceso?.

SOLUCIÓN

La ecuación ajustada que representa al proceso, y que acabamos de ajustar, y las cantidades de reactivos y productos que representa es:



y las cantidades que aparecen aquí son las cantidades correspondientes a cada sustancia que intervendrán en el proceso estequiométrico. Si se dispone de otras cantidades, como en este caso que disponemos de 12,7 g de cobre y no de 63,5, las cantidades de las demás sustancias se modificarán en la misma proporción.

Si queremos resolver el ejercicio utilizando reglas de tres, hemos de tomar para la primera línea de la misma las cantidades que nos aparecen en la relación anterior, y para la segunda, el dato que nos da el ejercicio: 12,7 g de cobre si queremos realizar los cálculos en gramos, o bien $12,7/63,5 = 0,2$ moles, si los queremos realizar en estas unidades.

$$\left. \begin{array}{l} 63,5 \text{ g de Cobre} \text{ ---- } 252 \text{ g de HNO}_3 \\ 12,7 \text{ g de Cobre} \text{ ---- } X \text{ g de HNO}_3 \end{array} \right\} X = \frac{12,7 \cdot 252}{63,5} = \mathbf{50,4 \text{ g de HNO}_3}$$

$$\left. \begin{array}{l} 63,5 \text{ g de Cobre} \text{ ---- } 187,5 \text{ g de Cu(NO}_3)_2 \\ 12,7 \text{ g de Cobre} \text{ ---- } X \text{ g de Cu(NO}_3)_2 \end{array} \right\} X = \frac{12,7 \cdot 187,5}{63,5} = \mathbf{37,5 \text{ g de Cu(NO}_3)_2}$$

$$\left. \begin{array}{l} 63,5 \text{ g de Cobre} \text{ ---- } 92 \text{ g de NO}_2 \\ 12,7 \text{ g de Cobre} \text{ ---- } X \text{ g de NO}_2 \end{array} \right\} X = \frac{12,7 \cdot 92}{63,5} = \mathbf{18,4 \text{ g de NO}_2}$$

$$\left. \begin{array}{l} 63,5 \text{ g de Cobre} \text{ ---- } 36 \text{ g de H}_2\text{O} \\ 12,7 \text{ g de Cobre} \text{ ---- } X \text{ g de H}_2\text{O} \end{array} \right\} X = \frac{12,7 \cdot 36}{63,5} = \mathbf{7,2 \text{ g de H}_2\text{O}}$$

Lo cual nos indica que para reaccionar completamente con 12,7 g de cobre se necesitan 50,4 g de ácido nítrico, obteniéndose en la reacción 37,5 g de nitrato de cobre(II), 18,4 g de óxido de nitrógeno(IV) y 7,2 g de agua.

Pero como el ácido nítrico de que se dispone es una disolución 0,5 Molar, la cantidad del mismo se debe expresar en volumen de disolución, para lo que es necesario recordar la expresión que nos daba la Molaridad de una disolución, teniendo en cuenta que se ha de tomar un volumen de disolución que contenga 50,4 g de dicho ácido.

$$M = \frac{\text{moles de soluto}}{\text{lítros de disolución}} = \frac{\text{gr de soluto}}{Pm \text{ soluto} \cdot l \text{ disolución}}$$

donde conocemos: la Molaridad de la disolución (0,5 M), los gramos de ácido nítrico (que es el soluto) que hemos de tener (50,4 g) y el peso molecular del mismo: 63 g/mol, por lo que si sustituimos, nos quedará:

$$0,5 \text{ Molar} = \frac{50,4 \text{ g}_s}{63 \frac{\text{g}_s}{\text{mol}_s} \cdot l \text{ disolución}}$$

$$l_{\text{disolución}} = \frac{50,4 \text{ g}_s}{63 \frac{\text{g}_s}{\text{mol}_s} \cdot 0,5 \frac{\text{Mol}_s}{\text{lítro}_{\text{disolución}}}} = \mathbf{1,6 \text{ litros de disolución}}$$

Es decir, que para que esta reacción se produzca se necesitan 1,6 litros de la disolución 0,5 Molar de ácido nítrico.

REACTIVOS IMPUROS

En ocasiones las sustancias que se manejan en el laboratorio o industria no son puras por lo que como cálculos previos se ha de determinar la cantidad de sustancia pura que interviene en la reacción, ya que las ecuaciones

balanceadas se refieren siempre a reactivos o productos puros.

REACTIVO LIMITANTE Y REACTIVO EN EXCESO

Cuando se produce una reacción química, ésta suele evolucionar hasta que uno de los reactivos se agota, el cual recibe el nombre de REACTIVO LIMITANTE, ya que la cantidad de este reactivo es la que nos limita la cantidad de producto que puede formarse. El otro reactivo, del cual sobra una cierta cantidad, recibe el nombre de REACTIVO EN EXCESO.

RENDIMIENTO DE UN PROCESO

Cuando se aplican las relaciones entre las cantidades de reactivos y/o productos que aparecen en la ecuación química, estamos aplicándolas a un procedimiento teórico (rendimiento de un 100%), en el cual se parte de la base que todo reactivo limitante forma los correspondientes productos, y sin que se pierda nada de estos durante el proceso.

Sin embargo, en la vida real raramente se produce esto ya que o bien no reacciona todo el reactivo o bien se pierde parte de los productos por reacciones colaterales o en los procesos de separación o purificación de los productos obtenidos.

Por ello se hace necesario definir el RENDIMIENTO DE UN PROCESO o PORCENTAJE DE RENDIMIENTO como el cociente entre la cantidad real obtenida en ese proceso y la cantidad teórica que debería obtenerse si se cumplieran exactamente las relaciones entre las cantidades que aparecen en la ecuación balanceada. Este rendimiento puede expresarse también en %:

$$\text{PORCENTAJE DE RENDIMIENTO} = \frac{\text{CANTIDAD REAL OBTENIDA}}{\text{CANTIDAD TEORICA QUE SE PODRIA OBTENER}} \cdot 100 = \quad \%$$

CALCULO DEL CALOR INTERCAMBIADO EN UNA REACCIÓN QUÍMICA

Además de las relaciones masa-volumen que acabamos de ver también pueden aplicarse estos cálculos al calor de reacción. Deben realizarse tomando la cantidad de calor intercambiado como un dato más de los que aparecen en la ecuación química balanceada, semejante a los de masa de reactivos y productos para realizar con ellos los pertinentes cálculos estequiométricos
