

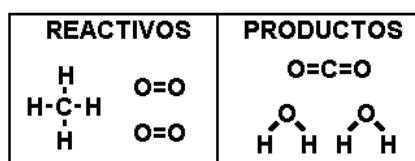
1- REACCIONES QUÍMICAS

1.1. Reacción química: reactivos y productos

Al calentar a 800°C carbonato de calcio CaCO_3 se desprende CO_2 gas y queda un residuo sólido de óxido de calcio CaO . Se ha producido una reacción química.

Una **reacción química** es un proceso por el cual una o varias sustancias iniciales, llamadas **reactivos** o **reaccionantes**, se transforman en otra u otras sustancias finales, llamadas **productos**.

En la reacción anterior hay un único reactivo, CaCO_3 , y dos productos, CO_2 y CaO . La desaparición de unas sustancias y aparición de otras lleva consigo la reorganización de los átomos que las forman, aunque el número de éstos no cambia. Lo que cambia son los enlaces químicos entre ellos.



La reacción química esquematizada a la izquierda tiene como reactivos una molécula de metano y dos moléculas de oxígeno, mientras que como productos aparecen una molécula de CO_2 y dos moléculas de agua. Si cuentas los átomos de cada especie observarás que hay un átomo de carbono, cuatro de oxígeno y cuatro de hidrógeno, tanto en los reactivos como en los productos. Sin embargo, han cambiado los enlaces químicos: se han roto cuatro enlaces C-H y dos $\text{O}=\text{O}$ para formarse dos $\text{C}=\text{O}$ y cuatro O-H. En este caso no se ha conservado ninguno de los enlaces iniciales; no obstante, para que haya reacción química no es necesario que se rompan todos los enlaces de los reactivos, algunos pueden conservarse.

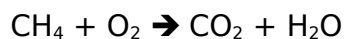
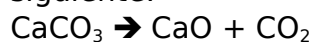
1.2- Ecuaciones químicas

Las dos reacciones indicadas previamente pueden describirse de la manera siguiente:

“El carbonato de calcio se descompone por acción del calor para dar óxido de calcio y dióxido de carbono”.

“El metano reacciona con oxígeno para dar dióxido de carbono y agua”.

En el lenguaje de la química las reacciones químicas se describen de una forma abreviada mediante **ecuaciones químicas**. Las anteriores se escriben del modo siguiente:



La flecha indica el sentido de la transformación; a la izquierda se colocan los reactivos y a la derecha los productos. En la ecuación química sólo aparecen las sustancias que se modifican en la reacción; otras, aunque estén presentes, si no participan en la reacción, no se indican. Por ejemplo, la primera reacción suele tener lugar al aire libre, en presencia de O_2 y N_2 atmosféricos, pero éstos, como no intervienen en la reacción, no aparecen en la ecuación química.

1.3- Ajuste de las ecuaciones químicas

Como se ha indicado anteriormente, el número de átomos de cada clase ha de ser el mismo en los reaccionantes y los productos. Si escribimos la reacción de descomposición del perclorato de potasio



se puede observar que el número de átomos de oxígeno no es el mismo en los reaccionantes que en los productos. Se dice que esa ecuación no está ajustada. Ajustar una ecuación química consiste en asignar a cada sustancia que participa en la reacción un coeficiente adecuado para que en los dos miembros haya el mismo número de átomos de cada elemento. En la reacción anterior basta colocar un 2 delante de O_2 para que quede:

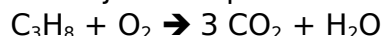


Normalmente para ajustar las reacciones químicas sencillas se puede usar el método del tanteo. Para ello se empieza ajustando los elementos que se encuentran en un sólo compuesto en reactivos y productos. Así en la reacción:

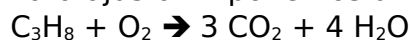


el carbono y el hidrógeno se hallan en un solo compuesto en reactivos y productos, C en C_3H_8 y CO_2 y H en C_3H_8 y H_2O .

Para ajustar C ponemos un 3 delante de CO_2 , quedando:



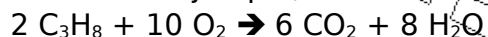
Para ajustar H ponemos un 4 delante de H_2O :



C y H ya están ajustados. Sólo queda hacerlo con O: A la izquierda hay dos y a la derecha 10. Ponemos un 5 delante de O_2 y la ecuación queda ajustada de la siguiente forma:

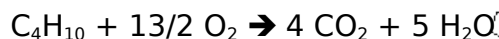


Una ecuación química ajustada nos indica la proporción en la que se produce la reacción y se buscan normalmente los coeficientes estequiométricos más sencillos, aunque otro ajuste con coeficientes múltiplo de los más sencillos también es válido. Por ejemplo, en el caso anterior también sería posible:



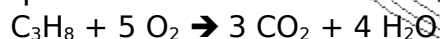
que es la ecuación anterior multiplicada por 2.

A veces se utilizan coeficientes fraccionarios, aunque normalmente sólo lo haremos con las moléculas diatómicas de H_2 , N_2 , O_2 , F_2 , Cl_2 , Br_2 e I_2 . Por ejemplo:



1.4- Interpretación cuantitativa de una reacción química

Las reacciones químicas ajustadas informan sobre las proporciones en las que intervienen las sustancias que reaccionan. Por ejemplo, la reacción



indica que por cada molécula de propano que reacciona lo hacen cinco de O_2 y se forman tres de CO_2 y cuatro de agua.

Esa proporción se mantiene a nivel molar; esto es, reaccionan $6,02 \cdot 10^{23}$ moléculas de propano con $5 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}$ de O_2 para dar $4 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}$ moléculas de CO_2 y $5 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}$ de agua, o lo que es lo mismo, reaccionan en la proporción de un mol de propano por cada cinco de O_2 , dando tres moles de CO_2 y cuatro de agua.

Por ejemplo, si en la reacción anterior reaccionan 10 moles de O_2 , podemos determinar los moles de propano que han reaccionado y los de productos formados, de la siguiente forma: si un mol de propano reacciona con cinco de O_2 :

$$n_{C_3H_8} = 10 \text{ mol } O_2 \cdot \frac{1 \text{ mol } C_3H_8}{5 \text{ mol } O_2} = 2 \text{ mol } C_3H_8$$

Del mismo modo se pueden calcular los moles de productos formados:

$$n_{CO_2} = 10 \text{ mol } O_2 \cdot \frac{4 \text{ mol } CO_2}{5 \text{ mol } O_2} = 8 \text{ mol } CO_2$$

$$n_{H_2O} = 10 \text{ mol } O_2 \cdot \frac{5 \text{ mol } H_2O}{5 \text{ mol } O_2} = 10 \text{ mol } H_2O$$

Por otra parte, si ponemos cantidades arbitrarias de los reactivos, normalmente uno de ellos está en exceso y el otro se consume en la reacción, puesto que las reacciones químicas que estudiaremos en este curso se producen hasta que alguno de los reactivos se agota. El reactivo que se agota se denomina **reactivo limitante** y no queda nada de él después de la reacción; el otro o los otros no se agotan y queda cierta cantidad después de la reacción.

Por ejemplo, si en la reacción anterior tratamos de hacer reaccionar 5 moles de propano con 8 moles de O_2 , los 5 moles de propano necesitarían para reaccionar:

$$n_{O_2} = 5 \text{ mol } C_3H_8 \cdot \frac{5 \text{ mol } O_2}{1 \text{ mol } C_3H_8} = 25 \text{ mol } O_2$$

Evidentemente no hay 25 moles de O_2 , pues sólo disponemos de 10. Por tanto los 5 moles de propano no pueden reaccionar porque no hay O_2 suficiente. O_2 es el reactivo limitante. Podemos calcular la cantidad de propano que reacciona:

$$n_{C_3H_8} = 8 \text{ mol } O_2 \cdot \frac{1 \text{ mol } C_3H_8}{5 \text{ mol } O_2} = 1,6 \text{ mol } C_3H_8$$

La conclusión es que reaccionan 1,6 moles de propano con 8 moles de O_2 y sobran el propano que no ha reaccionado:
 $5 - 1,6 = 3,4$ moles de propano

Por otra parte, la cantidad de reactivos consumida permite calcular la cantidad de los productos formados, a partir de cualquiera de los reactivos. Por ejemplo, a partir de O_2 :

$$n_{CO_2} = 8 \text{ mol } O_2 \cdot \frac{4 \text{ mol } CO_2}{5 \text{ mol } O_2} = 6,4 \text{ mol } CO_2$$

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = 8 \text{ mol O}_2 \cdot \frac{5 \text{ mol H}_2\text{O}}{5 \text{ mol O}_2} = 8 \text{ mol H}_2\text{O}$$

1.5- Rendimiento de una reacción química

Cuando se realizan los cálculos estequiométricos sobre la cantidad de productos que se obtienen en una reacción química, el resultado indica la **cantidad teórica** que debería obtenerse, que es la máxima. Sin embargo, por lo general, la **cantidad real** de producto que se obtiene en el laboratorio o en la industria en una reacción es menor que la teórica. Las razones son diversas ya que se puede perder cierta cantidad durante la manipulación, las condiciones de la reacción pueden no ser las adecuadas o la separación del producto puede ser complicada.

El rendimiento de una reacción química se expresa en tanto por ciento, de la siguiente forma:

$$\text{Rendimiento} = \frac{\text{cantidad real obtenida}}{\text{cantidad teorica obtenida}} \cdot 100$$

2- ENERGÍA EN LAS REACCIONES QUÍMICAS

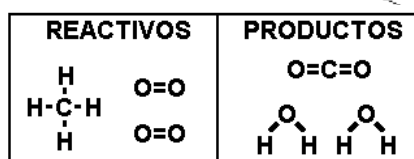
Es un hecho experimental que en toda transformación química se producen variaciones energéticas. Por ejemplo, cuando se produce la combustión del butano con oxígeno se forman CO_2 de carbono y agua, pero normalmente el objetivo de la combustión no es la formación de CO_2 , sino el aprovechamiento del calor que se desprende en la reacción. Otras reacciones, como las descomposiciones térmicas de CaCO_3 o KClO_3 , se producen con absorción de calor desde el exterior.

Cuando se quema gasolina en el interior del cilindro de un motor de explosión se desprende energía que se utiliza como energía mecánica de movimiento del automóvil. Del mismo modo, la energía liberada en forma de calor en la combustión del carbón en una central térmica se convierte después en energía eléctrica.

Vemos, pues, que las reacciones químicas se verifican con intercambio de energía con el medio que las rodea.

2.1- Reacciones exotérmicas y endotérmicas

En las reacciones químicas se rompen enlaces de los reactivos y se forman enlaces de los productos. Normalmente para romper enlaces químicos hay que dar energía (proceso desfavorable), pero el proceso de formación de enlaces libera energía (proceso favorable). El balance energético total de la reacción depende de los valores relativos de las energías de ruptura y formación de enlaces.



Así en la reacción de metano con oxígeno para dar dióxido de carbono y agua se han de romper cuatro enlaces C-H y dos enlaces O=O, formándose dos enlaces C=O y cuatro enlaces O-H. El balance total indica que se desprende energía hacia el exterior en forma de calor: se trata de una reacción exotérmica.

Hay otras reacciones en las que el balance total es el contrario, y necesitan tomar energía del exterior. Éstas se denominan reacciones endotérmicas

2.1- Ecuaciones termoquímicas

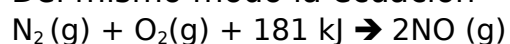
Una ecuación termoquímica indica, además de la correspondiente reacción química, el calor absorbido o desprendido en la misma. Se indica también el estado físico de reactivos y productos, pues el calor de reacción depende de él.

Así la ecuación



se lee: Cuando reacciona un átomo gramo de carbono sólido con un mol de oxígeno gaseoso para dar un mol de dióxido de carbono gaseoso se desprenden 393 kJ. Se trata, pues, de una reacción exotérmica.

Del mismo modo la ecuación



se lee: Cuando un mol de nitrógeno gas reacciona con un mol de oxígeno gas y absorben 181 kJ se forman dos moles de monóxido de nitrógeno. Se trata de una reacción endotérmica