

## Tema 1

### CONCEPTOS PRELIMINARES

#### 1. Introducción

La *Química* es la rama de la ciencia que estudia la *materia* y los cambios que ésta pueda tener. Por *materia* se entiende algo que tiene masa y volumen, es decir, que ocupa espacio como por ejemplo el agua, el aire, los metales, etc.

La química no sólo es ver cómo determinadas disoluciones cambian de color en un tubo de ensayos cuando se le añade alguna sustancia. El interés por la química aparece desde el momento en el que comprendemos que la vida, en el sentido más amplio de este concepto, se basa en la química. Fenómenos tales como el crecimiento de las plantas y el metabolismo, la reducción de la capa de ozono, la acción de los fármacos, el funcionamiento de las pilas de combustible y la creación así como las propiedades de nuevos materiales (polímeros conductores, nanomateriales, etc.) no pueden entenderse sin los conocimientos y perspectivas suministradas por la química.

#### 1.1. Las ramas de la química

En general, la visión de un químico es la de un personaje con bata que tiene en sus manos tubos de ensayos llenos de alguna sustancia. Pero esto, por supuesto es un estereotipo. El químico es mucho más. Es cierto que muchos químicos trabajan con tubos de ensayos, aunque hoy en día probablemente no es lo más habitual, de hecho hay muchos químicos que si lo hacen, esto ocurre en contadas ocasiones. Existen muchas clases de químicos, según en qué se hayan especializado. En general, la química suele dividirse en tres grandes grupos:

- a) Química orgánica. Estudia los compuestos del carbono
- b) Química inorgánica. Estudia todos los demás elementos y sus compuestos.
- c) Química física. Estudia los principios de la química.

Hoy en día se reconocen nuevas áreas de conocimiento cuyo columna vertebral es la química. Por ejemplo, tenemos la bioquímica (compuestos químicos, reacciones y otros procesos en los seres vivos), la química analítica (técnicas para la identificación de sustancias y su cuantificación), química teórica (estructura molecular y propiedades en términos de modelos matemáticos), ingeniería química (diseño de procesos químicos industriales), química medicinal (desarrollo de fármacos), química biológica (estructura y procesos biológicos), biología molecular (bases químicas y físicas de la función y diversidad biológicas), ciencia de los materiales (estructura química y composición de los materiales y relación con sus propiedades).

Queda claro por tanto, que la química es una de las ramas de la ciencia que debe considerarse como base fundamental para abordar con éxito muchos campos profesionales con carácter científico-técnico.

#### 2. La Química como ciencia experimental. El método científico

Se dijo anteriormente que la Química es una rama de la ciencia y como tal así debe ser tratada. Por tanto para entenderla es necesario entender la ciencia como tal, de dónde surge y cómo se trabaja con ella. Estas cuestiones quedan respondidas si se emplea el *método científico* hasta sus últimas consecuencias. El método científico es el procedimiento seguido para encontrar la explicación de un determinado hecho. Existen muchas variantes pero en líneas generales, el método científico consta de los siguientes pasos (Figura 1.1):

- i) Observación.- Ésta puede ocurrir por azar o en condiciones experimentales bajo estricto control.
- ii) Recogida de datos.- Lo observado debe recogerse en forma de datos, es decir, se realiza una medición.
- iii) Análisis de los datos.- Los datos deben analizarse (representaciones gráficas, tablas, imágenes) con objeto de encontrar regularidades o similitudes. Cuando esto ocurre de manera recurrente permitiendo emitir una afirmación o generalización, surge el establecimiento de una Ley (natural).
- iv) Hipótesis.- Una vez detectadas las regularidades, se deben plantear hipótesis, es decir posibles explicaciones de las leyes establecidas o de los datos obtenidos en términos de conceptos fundamentales.
- v) Teoría.- Una vez que la hipótesis establecida queda confirmada por nuevos resultados experimentales se puede pasar al planteamiento de una teoría que no es más que la explicación formal de una ley.
- vi) Modelo.- En general, los científicos interpretan una teoría mediante el empleo de modelos que no son más que versiones simples o simplificadas de lo estudiado y que finalmente dan lugar a expresiones matemáticas que permiten dar respuestas cuantitativas muy próximas a los datos obtenidos experimentalmente.

Por último, es preciso decir que la validez de una teoría y un modelo no sólo radica en su capacidad de explicar fenómenos, sino también en su posibilidad de hacer predicciones.

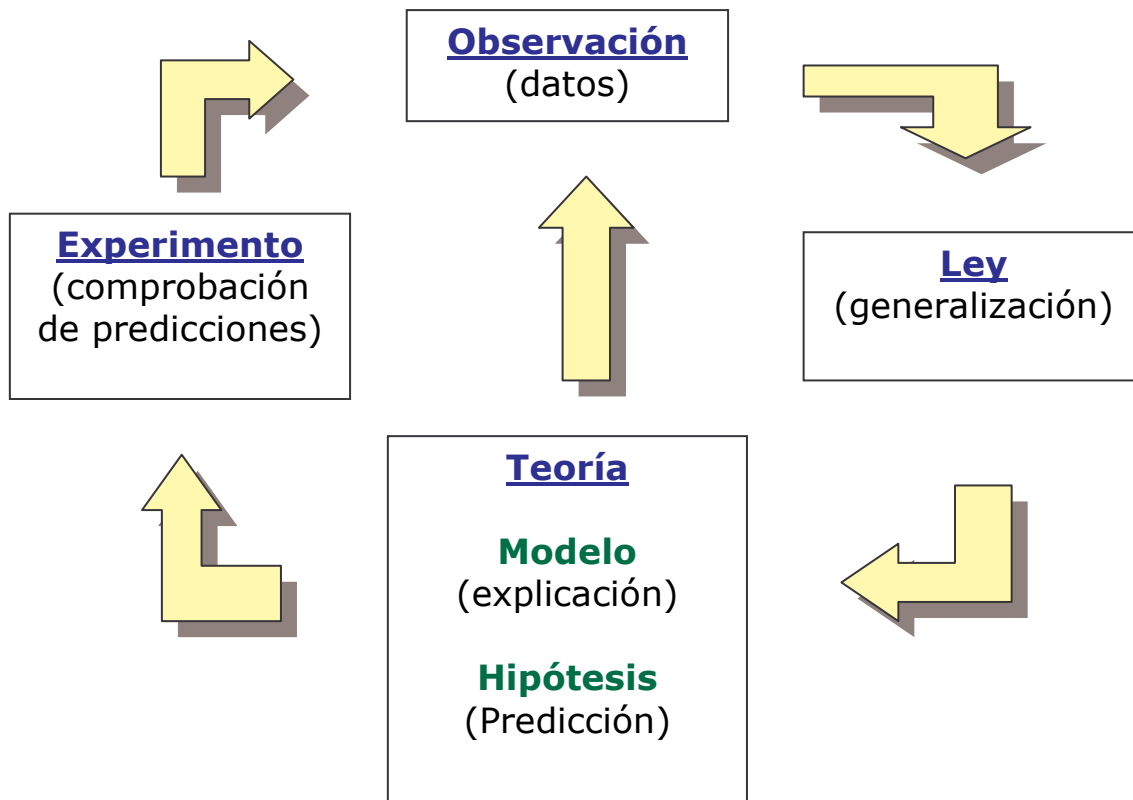


Figura 1.- Esquema de los pasos a seguir en el Método Científico

### 3. Conceptos preliminares

#### 3.1. Materia y energía

##### 3.1.1. Materia

Materia es todo lo que nos rodea. El aire, el agua, nuestro cuerpo. Son propiedades comunes a toda la materia tener masa y ocupar un lugar en el espacio. En química, una sustancia es una forma de materia simple y pura. Por tanto, el agua y el hierro son sustancias distintas. Sin embargo el aire, que también es materia está compuesta de varias sustancias, los gases, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno, vapor de agua, etc.

##### 3.1.1.1. Cantidad de materia

Hemos dicho que la materia se caracteriza por tener masa y ocupar sitio. Pues bien, por medio de cualquiera de estas dos propiedades podemos conocer la cantidad de materia: por su masa o por su volumen.

La masa es una de las magnitudes fundamentales del Sistema Internacional de Unidades (S.I.). Su unidad es el kilogramo (kg). El volumen es una magnitud derivada de la longitud. Su unidad en el S.I. es el metro cúbico ( $m^3$ ).

##### 3.1.1.2. Propiedades de la materia

Ejemplos generales de propiedades, es decir aspectos que caracterizan a la materia son: su olor, color, sabor, dureza, densidad, etc.

Las propiedades de la materia se pueden clasificar en función de su dependencia de la cantidad de materia en:

- a) *Propiedades intensivas*. Son las que no dependen de la cantidad de materia, como la densidad o el índice de refracción. Por ejemplo, por mucho agua que tenga, su densidad siempre va a ser la misma, aproximadamente  $1 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$  en condiciones normales de trabajo en un laboratorio ( $25^\circ\text{C}$  de temperatura y 1 atmósfera de presión), al mismo tiempo su índice de refracción siempre es el mismo (el ángulo con el que se desvía la luz al pasar del aire al agua es independiente de la cantidad de agua).
- b) *Propiedades extensivas*. Son las que dependen de la cantidad de materia. Por ejemplo, la masa y el volumen.

Por otro lado, las propiedades de la materia se pueden agrupar en dos grandes categorías:

- a) *Propiedades físicas*. Son aquellas que presenta la materia sin que cambie su naturaleza, es decir su constitución básica. Por ejemplo, el color, la conductividad térmica o eléctrica, el punto de fusión, etc.
- b) *Propiedades químicas*. Son las que se ponen de manifiesto cuando se producen cambios en la naturaleza de la materia. Por ejemplo, cuando arde el butano o se oxida el hierro. Tales propiedades son por ejemplo, la acidez, la basicidad, carácter reductor, etc.

Además, la materia se puede presentar en diferentes formas denominadas estados de agregación de la materia. Los más comunes son el sólido, el líquido y el gaseoso. Desde un punto de vista fenomenológico (experimental), las características de estos tres estados de agregación son las siguientes. El estado sólido se presenta con una forma y volumen fijos, el líquido con un volumen fijo y una forma variable adaptándose a la del recipiente que lo contiene y el gaseoso con una volumen y forma variables adaptándose al del recipiente que lo contiene. Estas características se pueden explicar en función de la disposición e interacción entre las unidades básicas que constituyen la materia en un determinado estado de agregación.

### **3.1.1.3. Clasificación de la materia**

#### *a) Sustancias puras*

Es así como se denomina a la materia cuando ésta presenta composición fija, no puede separarse en otras sustancias por medios físicos, y presentan una temperatura constante durante el cambio de estado. Si la sustancia no fuera pura es que está formada por más de una sustancia y estaríamos hablando de una mezcla con más de una temperatura de cambio de estado o una temperatura variable a medida que se produce el cambio.

Las sustancias puras pueden ser:

#### *b) Elementos*

Son las sustancias puras más simples y no pueden descomponerse por ningún medio a no ser que lo hagan de manera espontánea por ser elementos radiactivos.

*c) Compuestos*

Son sustancias compuestas por más de un elemento con composiciones fijas características. En este caso sí pueden descomponerse en otros elementos por métodos químicos y físicos.

*d) Mezclas*

Es materia constituida por más de una sustancia pura (componente), es decir por más de un elemento o compuesto. Su composición es variable, es decir la cantidad relativa de cada uno de los componentes puede cambiar. Pueden separarse por medios físicos y la temperatura a la cual se produce el cambio de estado es variable o múltiple (cuando cada componente cambia de estado de manera independiente).

*e) Fase*

En una determinada muestra de materia, pura o no, una fase se define como una región de la misma en la que todas las propiedades químicas y físicas son uniformemente las mismas. No debe confundirse entre fase y estado de agregación, pues distintas fases pueden estar en un mismo estado de agregación, sus definiciones no coinciden.

*f) Mezcla homogénea*

También se denomina disolución. Es una mezcla con una única fase

*g) Mezcla heterogénea*

Es una mezcla que posee dos o más fases

#### **3.1.1.4. Purificación e identificación de sustancias**

Las sustancias diferentes se distinguen por sus propiedades intensivas. Esto quiere decir que se puede identificar una o varias sustancias que componen un muestra mediante el registro de su color, su densidad, su punto de fusión, su punto de ebullición y por sus estados de agregación en unas condiciones determinadas de presión y temperatura.

En general, para identificar sustancias es necesario un proceso básico previo que consiste en purificar la sustancia a identificar, es decir, separarla de otras con las que podría estar mezclada.

Siempre que la mezcla esté formada por una sustancia volátil (que pasa fácilmente al estado gaseoso) y otra que no lo sea, es fácil separarlas por sublimación si es una mezcla sólida o destilación (evaporación preferencial de uno de los componentes y su posterior condensación) si es una mezcla líquida. Cuando se trata de mezcla de sustancias volátiles, el procedimiento no es tan sencillo. Habría que repetir el proceso de destilación muchas veces, utilizando cada vez el producto destilado anteriormente, a este proceso se le denomina destilación fraccionada.

Es posible que los componentes de la mezcla no sean volátiles de manera que será necesario buscar otros métodos para conseguir realizar la separación buscada. En este caso en general se busca una propiedad física que los diferencie de manera clara. Por ejemplo, su solubilidad (grado en el que uno de los componentes de la mezcla inicial se disuelve, se mezcla homogéneamente para dar una disolución) en un determinado disolvente. Al no ser solubles otros componentes, estos se pueden separar por un simple proceso de filtración.

Otro procedimiento para purificar sustancias es la cristalización, disolución de sustancia y posterior ordenación de sus unidades constituyentes durante el proceso de evaporación del disolvente. Se puede purificar más el producto volviendo a disolver el producto de cristalización y cristalizar otra vez (recristalización).

Hay muchos otros métodos para purificar sustancias, como la cromatografía, la electroforesis, etc. Pero su fundamento no se encuentra enmarcado dentro de los objetivos que se pretenden en este curso.

Para identificar una sustancia, se pueden seguir dos caminos

- a) *El análisis*. A veces consiste en la descomposición de la sustancia en sus constituyentes para saber cuáles son y en qué proporción la integran. El análisis químico utiliza procedimientos físicos y químicos para la identificación de las sustancias.

En la identificación de un producto desempeñan un papel importante sus propiedades físicas (color, olor, densidad, etc.). Un dato de gran valor es el punto de fusión si es un sólido o el de congelación o de ebullición si es un líquido, pues todas las sustancias puras funden, hierven o se congelan a una temperatura determinada.

Otros procedimientos fisicoquímicos más modernos permiten identificar sustancias puras. Por ejemplo, la absorción Ultravioleta, UV, o infrarroja, IR.

- b) *Síntesis*. Por ejemplo, si queremos confirmar que el cloruro de hidrógeno es una sustancia que contiene cloro e hidrógeno, haremos reaccionar ambos elementos puros y compararemos la sustancia formada con el cloruro de hidrógeno, HCl, para ver si sus propiedades son idénticas.

### 3.1.2. Energía

La energía es la capacidad de hacer trabajo. Se realiza trabajo si un objeto se mueve contra una fuerza que se le opone.

La energía mecánica es la energía poseída por un objeto debido, ya sea a su movimiento, energía cinética ( $E_k$ ), o a su posición, energía potencial ( $E_p$ ). Por tanto, la energía total de dicho objeto será la suma de las dos.

$$E_T = E_k + E_p \quad (1)$$

La unidad del sistema internacional, SI, para la energía es el Joule (J) y

$$1 \text{ J} = 1 \text{ kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{s}^{-2}$$

La energía cinética,  $E_k$ , es la energía que posee un cuerpo debido a su movimiento. Para un cuerpo de masa  $m$  que se mueve a una velocidad  $v$ , la energía cinética es

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2 \quad (2)$$

La energía potencial de un objeto,  $E_p$ , es la energía que éste posee a causa de su posición en un campo de fuerzas, por tanto su expresión dependerá de la naturaleza de las fuerzas que el objeto experimenta. Por ejemplo, la energía potencial gravitatoria se asocia a la energía que posee una partícula en un campo gravitatorio, mientras que la energía electrostática se asocia a la que posee una partícula cargada en un campo electrostático.

Un cuerpo de masa  $m$  a una altura  $h$  sobre la superficie de la tierra tiene una energía potencial gravitatoria

$$E_p = mgh \quad (3)$$

Donde  $g$  es el valor de  $g$ , la aceleración de la gravedad, que se suele tomar como un valor constante e igual a  $9.81 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$ .

La energía potencial electrostática, es decir, la debida a atracciones y repulsiones entre partículas cargadas es de gran importancia en química, que estudia electrones, núcleos atómicos e iones, todos cargados. La energía potencial electrostática de una partícula de carga  $q_1$  a una distancia  $r$  de otra partícula de carga  $q_2$  es proporcional a las dos cargas e inversamente proporcional a la distancia que las separa

$$E_p = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (4)$$

Esta expresión se aplica cuando las cargas están en el vacío, siendo  $\epsilon_0$  una constante fundamental denominada “permitividad del vacío” cuyo valor es  $8.854 \times 10^{-12} \text{ J}^{-1}\cdot\text{C}^2\cdot\text{m}^{-1}$ .

Otro tipo de energía es la denominada energía electromagnética que es la energía de un campo electromagnético, en concreto la transportada por una radiación electromagnética (la luz visible/ultravioleta, ondas radio, etc.).

Una característica muy importante de la energía es que la contenida en el universo se mantiene constante, es decir no se puede crear ni destruir aunque sí se puede transformar un tipo de energía en otro.

### 3.1.3. Calor y temperatura

La diferencia entre calor y temperatura suele entenderse mal, pero es muy importante. Calor o energía calorífica es la energía que se transfiere directamente de un objeto a otro. Esta energía no se encuentra en forma de calor antes o después de la transferencia, sino durante la transferencia. El calor es la energía en tránsito. Así, después de que una cantidad de energía calorífica se ha transferido a un objeto no se dirá que el objeto “contiene más calor”. En tal caso la energía aumentada no deberá llamarse calor. Evidentemente, la energía total del objeto debe aumentar de alguna manera. Esto puede suceder de tres modos: o aumentan las energías cinéticas de las partículas internas, o aumentan las energías potenciales, o ambas simultáneamente.

Cuando se producen reacciones químicas se suministran o absorben diferentes cantidades de calor. Las cantidades dependen de la reacción y de las cantidades de las sustancias que intervienen. Una reacción que libera calor se dice que es exotérmica y una que lo absorbe endotérmica.

La temperatura de un objeto mide la energía cinética promedio de las partículas que componen un objeto. Cuando se adiciona calor a un objeto, sus partículas (átomos, moléculas o iones) se mueven más rápidamente en promedio, aumentando así su energía cinética. Se observa este aumento como un aumento de la temperatura. Lo que realmente acontece si dos objetos con temperaturas diferentes se ponen en contacto y la del más caliente decrece y la del más frío aumenta es que el objeto más caliente pierde energía calorífica hacia el más frío.

Algunas veces al añadir calor a un objeto, no hay aumento de temperatura. Esto significa que la energía cinética promedio no está aumentando sino que lo hace la energía potencial promedio. Esto acontece cuando una sustancia sufre un cambio de estado.

### **3.2. Átomos, moléculas e iones**

#### *i) átomos*

La primera teoría atómica fue propuesta por J. Dalton en 1805 basándose en medidas de las masas de elementos separados y combinados. Hoy en día es posible visualizar átomos con técnicas sofisticadas como por ejemplo la Microscopía de Efecto Túnel (Scanning Tunneling Microscopy, STM).

Dalton postuló que los átomos eran indivisibles y, desde su punto de vista llevaba razón. En efecto, él necesitó introducir el concepto de átomo para explicar las reacciones químicas y sus leyes y precisamente en estas reacciones los átomos no se dividen. Pero hay una serie de hechos experimentales que demuestran que el átomo es algo complejo, que está constituido por partículas más pequeñas. Tales hechos experimentales son la electrolisis, la descarga en gases y la radiactividad. A partir de dichos experimentos se demostró la existencia de los electrones, partículas cargadas negativamente, los protones, partículas cargadas positivamente y los neutrones sin carga. Por otro lado, mediante espectrometría de masas se descubrió la existencia de átomos de un mismo elemento con diferente masa de ahí que fuera necesario para un mismo elemento hacer la distinción entre lo que se denominaron isótopos. Los isótopos de un elemento son



distintos átomos de un mismo elemento que se poseyendo el mismo número de protones y electrones se diferencian en el número de neutrones de ahí que posean diferente masa.

Debido a lo anterior fue necesario distinguirlos mediante el empleo de símbolos que denotan un determinado elemento junto con unos números que designen el número de protones y neutrones en el átomo. Así se define el número atómico  $Z$  como el número de protones que posee un determinado átomo de un elemento, mientras que el número másico  $A$  es la suma del número de protones y el de neutrones. De esta manera un isótopo se designará con un símbolo identificativo del elemento y el número atómico en la parte inferior izquierda del símbolo y el número másico en la parte superior izquierda. Por ejemplo, se sabe de la existencia de tres isótopos de carbono que se designarían por:

${}^{12}_6\text{C}$ ;  ${}^{13}_6\text{C}$ ;  ${}^{14}_6\text{C}$  con 6, 7 y 8 neutrones respectivamente.

Se puede determinar la masa de cada átomo de un elemento. Tal masa podría expresarse en kg pero, por una parte esto resultaría incómodo (números muy pequeños) y, por otro, al físico o al químico lo que le interesa es conocer las masas relativas de los átomos para compararlas entre sí.

Desde 1961 se toma como patrón de masas atómicas la del isótopo estable más ligero y abundante del carbono ( ${}^{12}_6\text{C}$  **carbono doce**) y al que, por convenio, se le asigna el valor de 12.0000. La unidad atómica de masas, u.m.a., es por definición, un doceavo de la masa del isótopo de carbono doce.

## ii) *Elementos. Los símbolos de los elementos y la tabla periódica*

Un elemento es una sustancia constituida por átomos que poseen las mismas propiedades químicas. Un átomo es la partícula más pequeña de un elemento que posee las propiedades químicas del elemento.

Los nombres de los elementos tienen múltiples procedencias. Por supuesto, por la persona que lo descubrió, lugar de procedencia, etc.

Los elementos se representan mediante un símbolo químico que es una abreviatura del nombre del elemento. Algunos están formados por la primera letra y otros por la primera y la segunda.

Los elementos se suelen colocar en un orden especial en lo que se llama la tabla periódica (Figura 2). La localización de un elemento en la tabla periódica puede ser una guía excelente para conocer sus propiedades y el tipo de compuestos que dicho elemento puede formar.

**Tabla Periódica de Elementos**

**Elemento destacado: Hidrógeno (H)**

- Número atómico: 1
- Peso atómico: 1,00797
- Valencia: 1
- Punto de Ebullición en °C: -252,7
- Punto de fusión en °C: -259,2
- Densidad (g/ml): 0,071
- Símbolo: H
- Estructura atómica:  $1s^1$
- Nombre: Hidrógeno

**Legenda:**

- Metalos (Verde)
- Metaloides (Amarillo)
- No metalos (Rosa)
- Gases nobles (Gris)

(\*) Base en peso atómico carbono de 12 ( ) indica el más estable o el de isótopo más conocido.

Figura 2.- La tabla periódica (tomado del siguiente enlace [http://www.mcgraw-hill.es/bcv/tabla\\_periodica/mc.html](http://www.mcgraw-hill.es/bcv/tabla_periodica/mc.html))

## ii) Compuestos

Un compuesto es una sustancia que contiene átomos de dos o más elementos en una relación definida. Los diferentes elementos en un compuesto no están mezclados sino que sus átomos están unidos, mediante lo que denominamos enlace, de alguna manera específica. Por ahora, diremos que existen dos tipos de compuestos: moléculas e iones.

Las moléculas son compuestos formados por un grupo de átomos enlazados que dan lugar a una sustancia eléctricamente neutra.

Los iones son compuestos formados por un grupo de átomos enlazados que dan lugar a una sustancia eléctricamente cargada (positiva o negativamente). Es cierto que existen otros tipos de iones que no están formados por átomos enlazados (iones monoatómicos) pero a estos no nos estamos refiriendo en estos momentos.

Los compuestos se pueden representar a partir de las fórmulas moleculares o iónicas que muestran el número relativo de átomos de cada elemento en un compuesto en términos de símbolos químicos de los elementos. Si la fórmula muestra simplemente el número relativo de átomos nos referimos a la fórmula empírica que es la que se puede obtener a partir de datos experimentales. Si la fórmula muestra la relación final total de átomos en el compuesto nos referimos a la fórmula molecular o iónica.

## 4. Medidas y Unidades

Es de todos bien sabido que para poder llevar a cabo el método científico en primer lugar es necesario observar y de esa observación recopilar los datos asociados a dicha observación, a este proceso lo denominamos medida. Lo que se mide es algo que puede tener un valor alto o bajo de ahí que hablemos de magnitudes. De todas formas si a la medida de una magnitud que irá asociada a un número no la acompañamos de algo que identifique la magnitud será imposible saber por el resto que no realizaron la medida que es lo que se midió en realidad. A ese algo que identifica a la magnitud se le denomina unidad.

Las magnitudes más empleadas por los químicos son la masa, m, el volumen, V y la temperatura, T.

La masa de una muestra es la cantidad de materia que contiene. El volumen es la cantidad de espacio que ocupa y la temperatura indica lo caliente o frío que está.

#### 4.1. Sistema Internacional de Unidades (S.I.)

La medida cuantitativa de una propiedad se realiza por comparación con la medida de la misma propiedad con una unidad patrón. Siete son las unidades básicas que constituyen el fundamento del S.I. éstas aparecen reflejadas en la tabla 1.

Tabla 1.- Unidades básicas del Sistema Internacional de Unidades

Magnitud	Nombre de la Unidad	Símbolo
Masa	Kilogramo	kg
Longitud	Metro	m
Tiempo	Segundo	s
Corriente eléctrica	Amperio	A
Temperatura	Kelvin	K
Intensidad de luz	Candela	Cd
Cantidad de sustancia	Mol	mol

##### 4.1.1. Unidades derivadas

Las unidades derivadas son las unidades que le corresponden a magnitudes que provienen de la combinación (multiplicación, división) de otras cuyas unidades son básicas. Ejemplos de estas magnitudes son el volumen, la fuerza, la energía, la presión, la potencia, etc.

El Newton (N), por ejemplo, es la unidad del S.I. de la fuerza. La fuerza es una influencia que modifica el estado de movimiento de un objeto. De acuerdo con la segunda ley de Newton, cuando un objeto experimenta una fuerza éste es acelerado. La aceleración, a, de un objeto, el cambio de velocidad en el tiempo es proporcional a la fuerza que éste experimenta, según

$$\text{Masa} \times \text{aceleración} = \text{fuerza, o } m \times a = F \quad (5)$$

Por tanto 1 Newton es la fuerza necesaria para acelerar una masa de 1 kilogramo, 1 metro por segundo en cada segundo

$$1N = 1 \frac{kg \cdot m}{s^2}$$

La unidad del S.I. de la energía es el Joule (J). Se define como la energía gastada (o el trabajo realizado) cuando una fuerza de 1 Newton mueve un objeto de 1 kilogramo de masa 1 metro de longitud, en la dirección en la que se aplica la fuerza. Así,

$$1J = 1N \cdot m = 1 \frac{kg \cdot m^2}{s^2}$$

A parte de lo anterior, a veces los datos recogidos son o muy altos o muy bajos respecto de la unidad correspondiente de ahí que por facilitar la tarea de expresar los resultados se recurra a la utilización de múltiplos o submúltiplos de las unidades. En la tabla 2 aparecen los múltiplos y submúltiplos de las unidades métricas.

Tabla 2.- Múltiplos y submúltiplos de las unidades

Prefijo	Símbolo	Significado	Ejemplo
Tera	T	$10^{12}$	1 terametro(Tm)= $1 \times 10^{12}$ m
Giga	G	$10^9$	1 gigametro(Gm)= $1 \times 10^9$ m
Mega	M	$10^6$	1 megametro(Mm)= $1 \times 10^6$ m.
Kilo	K	$10^3$	1kilómetro(km) = $1 \times 10^3$ m.
deci	d	$10^{-1}$	1decímetro(dm) = $1 \times 10^{-1}$ m
Centi	c	$10^{-2}$	1centímetro(cm)= $1 \times 10^{-2}$ m
mili	m	$10^{-3}$	1milímetro(mm) = $1 \times 10^{-3}$ m.
micro	$\mu$	$10^{-6}$	1micrómetro( $\mu$ m) = $1 \times 10^{-6}$ m
Nano	n	$10^{-9}$	1nanómetro(nm) = $1 \times 10^{-9}$ m
pico	p	$10^{-12}$	1picómetro(pm) = $1 \times 10^{-12}$ m
femto	f	$10^{-15}$	1femptometro(fm) = $1 \times 10^{-15}$ m

La unidad derivada del S.I. de la presión es el Pascal (Pa), definida como 1 Newton de fuerza por metro cuadrado de área, es decir

$$1Pa = 1 \frac{N}{m^2} = 1 \frac{kg}{m \cdot s^2}$$

pero los químicos suelen emplear la atmósfera estándar (atm) y el milímetro de mercurio (mmHg) como unidades de presión.

La temperatura en química suele venir dada en la escala Celsius. En esta escala, el agua congela a valor cero, es decir cero grados Celsius o 0°C, mientras que ebulle a 100°C.

No obstante existen otras escalas para las que las unidades de la temperatura son diferentes, veamos cuál es la relación entre ellas.

En la escala Fahrenheit el agua congela a 32°F y ebulle a 212°F. Se puede convertir una temperatura de una escala en la otra sin más que utilizar la relación:

$$^{\circ}\text{F} = 1.8 (\text{T en } ^{\circ}\text{C}) + 32 (^{\circ}\text{C}) \quad (6)$$

La escala más importante es la que se basa en el S.I., llamada Kelvin. El punto cero en esta escala es el llamado cero absoluto de temperaturas, la temperatura más baja teóricamente alcanzable. El segundo punto fijo en esta escala es la temperatura la cual pueden coexistir indefinidamente el agua en estado sólido, líquido y gaseoso. A esta temperatura, llamada temperatura del punto triple del agua, se le asignó el valor de 273.1600 K. La escala Kelvin es una de las diferentes escalas llamadas escalas absolutas, debido al empleo del acero absoluto como punto fijo.

$$^{\circ}\text{C} = \text{K} - 273.1600 \quad (7)$$

En cuanto a la energía, para muchos químicos el Joule es menos útil que su homólogo mayor, el kilojoule (kJ). Una unidad común de energía es la caloría (cal) cuya equivalencia con el Joule es tal que

$$1 \text{ cal} \diamond 4.18 \text{ J}$$

#### 4.1.2. Factores de conversión

El factor de conversión es el número por el que es necesario multiplicar el valor asociado a una magnitud en unas determinadas unidades para convertirlo en el valor que tendría con otras unidades (derivadas, múltiplos o submúltiplos).

Para realizar una conversión de unidades, es decir conseguir un valor en unas unidades concretas (información requerida) es necesario multiplicar el valor de la magnitud en otras unidades (información dada) por el factor de conversión. Es decir,

$$\text{Información requerida} = \text{Información dada} \times \text{factor de conversión} \quad (8)$$

Por tanto,

$$\text{Factor de conversión} = \frac{\text{Unidades requeridas}}{\text{Unidades dadas}} \quad (9)$$

Con objeto de facilitar la comprensión de cómo se realiza un cambio de unidades (conversión) mediante la utilización del factor de conversión veamos un ejemplo sencillo:

Transformar un área de 20 cm<sup>2</sup> al valor del área en m<sup>2</sup>.

$$\text{Área (m}^2\text{)} = \quad 20 \text{ cm}^2 \times \left( \frac{10^{-2} \text{ m}}{1 \text{ cm}} \right)^2 = 20 \times 10^{-4} \text{ m}^2$$

Información requerida    Información dada    Factor de conversión

## 4.2. Medida. Exactitud y Precisión

La exactitud hace referencia a la veracidad del número en un sentido absoluto. El término precisión no se refiere a la veracidad absoluta del número sino al grado de esfuerzo y cuidado que se tuvo en la obtención del número (la medida).

Las cifras significativas son dígitos que sirven para establecer el valor del número. Los ceros indicados únicamente para localizar el punto decimal no son cifras significativas, así, el número 4.56 tiene tres cifras significativas y lo mismo acontece con el número 0.00456.

Cuando un número se escribe correctamente, se suele seguir la regla de que la última cifra significativa (a la derecha) es la única que puede ser un poco imprecisa o dudosa.

Cuando se realiza una medida, el dato obtenido debe expresarse de tal modo que quede reflejada la precisión con que se realizó la medida. Por ejemplo, si pesamos 2 g de MgCl<sub>2</sub> en una balanza cuya precisión es de 1 mg, el dato obtenido debería expresarse como 2.000 g, donde el tercer cero después del punto decimal nos indica la posición de la cifra significativa asociada a los miligramos.

Al realizar cálculos con números determinados experimentalmente es importante que cada resultado se exprese con el número propio de cifras significativas. Para ser específico un resultado calculado no debe expresar mayor o menor precisión que la justificada por los números en los que se basa el cálculo. Con el fin de asegurar que éste es el caso, se emplean dos reglas para el cálculo aritmético. La primera establece que en la adición y sustracción el número de dígitos a la derecha del punto decimal en un resultado calculado debe ser el mismo que el número de tales dígitos en el término que suma o resta tiene menos dígitos a la derecha del punto decimal. De manera que, en algunos casos, será necesario realizar una aproximación o redondeo. Por ejemplo:

La suma 3.45 + 2.1 es igual a 5.55, sin embargo, el resultado no puede tener más de un dígito después del punto decimal, por tanto es necesario redondear el resultado a 5.6.

En la multiplicación y división es necesario contar las cifras significativas y asegurarse de que el número de cifras significativas en el resultado sea el mismo que el mínimo número de cifras significativas de cualquiera de los términos multiplicados o divididos.

Por ejemplo la multiplicación 3.11 (tres cifras significativas) × 4.0 (dos cifras significativas) = 12.44 (cuatro cifras significativas), como el resultado no puede tener más de dos cifras significativas, entonces es necesario redondear el resultado a 12.

### 4.2.1. Errores en las medidas

*La estimación del error de una medida tiene siempre una componente subjetiva. En efecto, nadie mejor que un observador experimentado para saber con buena aproximación cuál es el grado de confianza que le merece la medida que acaba de tomar. No existe un conjunto de reglas bien fundadas e inalterables que permitan determinar el error de una medida en todos los casos imaginables. Muchas veces es tan importante consignar cómo se ha obtenido un error como su propio valor.*

Sin embargo, la aplicación de algunos métodos estadísticos permite objetivar en gran medida la estimación de errores aleatorios. La estadística permite obtener los parámetros de una población (en este caso el conjunto de *todas* las medidas que es posible tomar de una magnitud), a partir de una muestra (el número limitado de medidas que podemos tomar)

#### **4.3.1. Mejor valor de un conjunto de medidas**

Supongamos que medimos una magnitud un número  $n$  de veces ( $x_1, x_2, \dots, x_n$ ). Debido a la existencia de errores aleatorios, las  $n$  medidas serán en general diferentes.

El método más razonable para determinar el mejor valor de estas medidas es tomar el valor medio. En efecto, si los errores son debidos al azar, tan probable es que ocurran por defecto como por exceso, y al hacer la media se compensarán, por lo menos parcialmente. El valor medio se define por:

$$\bar{x} = \text{media de } N \text{ medidas} = \frac{\sum_{i=1}^N x_i}{N}$$

y este es el valor que deberá darse como resultado de las medidas.

## **5. Moles y Masas molares**

### *i) El mol*

Según la definición de masa atómica, puede comprobarse que en 12.0000 g del isótopo 12 del carbono, en 1.00797 g de hidrógeno natural y en 15.9997 g de oxígeno natural, hay el mismo número de átomos.

Se llama número de Avogadro,  $N_{av}$ , a un número igual al de los átomos existentes en 12 gramos, exactamente, del isótopo doce del carbono y su valor es  $6.0221 \times 10^{23}$ .

Por definición, un mol de sustancia equivale a  $N_{av}$  (número de avogadro) partículas de dicha sustancia.

### *ii) La masa molar*

La masa molar de un elemento es la masa por mol de átomos de dicho elemento. En el caso de un compuesto es la masa por mol de moléculas o iones de dicho compuesto.

### iii) Volumen molar

Es el volumen ocupado por mol de cualquier sustancia gaseosa o líquida. En concreto Un mol de cualquier gas (considerado ideal) a 0°C y a la presión de 760 mmHg ocupa 22.4 litros.

## 5.1. Determinación de las fórmulas químicas

Para determinar la fórmula empírica de un compuesto, se comienza midiendo la masa de cada elemento presente en una muestra. El resultado se expresa en general como composición porcentual de la masa, es decir la masa de cada elemento expresada como tanto por ciento de la masa total del compuesto:

$$\text{Porcentaje en masa del elemento, \%m} = \frac{\text{masa del elemento en la muestra}}{\text{masa total de la muestra}} \times 100\% \quad (10)$$

Posteriormente, se determina para una determinada cantidad de muestra (podrían ser 100 g) el número de moles de cada uno de los átomos que forman parte del compuesto. Para eso lo único que hay que hacer es dividir la masa de cada elemento por la masa de un mol de dicho elemento (su masa atómica).

Una vez que se ha calculado el número de moles de cada elemento en una masa determinada de muestra, se calcula la cantidad relativa de moles de cada uno de los elementos del compuesto. Para ello se selecciona el cálculo más sencillo que permita obtener número enteros. De esta manera de todos los elementos se toma el valor del menor número de moles y se divide por el número de moles de cada elemento. Obteniéndose en cada caso el número de moles relativo de cada elemento respecto de aquél que posee menor número de moles. Por último, la fórmula se representa escribiendo los símbolos de los elementos que componen el compuesto y en cada uno de ellos en su parte inferior derecha se coloca el valor relativo de moles obtenido en cada caso.

La manera más sencilla de explicar cómo se realiza la determinación de una fórmula empírica es a través de un ejemplo.

Un laboratorio de análisis de vitamina C mostró que su composición porcentual en masa es de: 40.9% de C; 4.57% de H y 54.5% de O. ¿Cuál es su fórmula empírica?

- i) determinación de la cantidad en moles de cada elemento presente en 100 g de muestra

$$C(\text{mol}) = 40.9\text{g} \times \frac{1\text{mol}}{12.01\text{g}} = 3.41\text{mol}$$

$$H(\text{mol}) = 4.57\text{g} \times \frac{1\text{mol}}{1.008\text{g}} = 4.53\text{mol}$$

$$O(\text{mol}) = 54.5\text{g} \times \frac{1\text{mol}}{16.00\text{g}} = 3.41\text{mol}$$



sabemos que el número de átomos es directamente proporcional al número de moles de cada elemento, por tanto la cantidad relativa en átomos de cada elemento se puede obtener dividiendo el número de moles de cada elemento por el menor número de moles obtenido para los elementos en cuestión, en este caso 3.41. Por tanto:

$$\text{C} : \text{H} : \text{O} = 3.41 : 4.53 : 3.41 = 1 : 1.33 : 1$$

Expresándolo mediante el menor número entero de átomos (en este caso multiplicando por tres) tenemos el menor número entero relativos de átomos.

$$\text{C} : \text{H} : \text{O} = 3 : 4 : 3$$

Muchas veces se necesita saber la fórmula molecular de un compuesto que muestra el número real de átomos de cada elemento presente en una molécula, para ello es necesario conocer la masa molar del compuesto y su fórmula empírica.

La masa molar de un compuesto es la masa por mol de moléculas de un determinado compuesto. Es decir la suma de las masas atómicas de los elementos que componen el compuesto multiplicado en cada caso por el de átomos correspondiente. Así, la masa molar del agua, cuya fórmula molecular es  $\text{H}_2\text{O}$ , sería:

$$\begin{aligned} \text{Masa molar del } \text{H}_2\text{O} &= 2 \cdot (\text{masa atómica del H}) + \text{masa atómica del O} \\ \text{Masa molar del } \text{H}_2\text{O} &= 2 \cdot 1.008 + 16.00 = 18.02 \end{aligned}$$

#### *Determinación de una fórmula molecular a partir de una fórmula empírica*

Lo único que es necesario es calcular la masa asociada a la fórmula empírica y obtener el cociente entre ésta y la masa molecular que se debe suministrar como dato. El valor del cociente nos indicará el número por el cual hay que dividir o multiplicar el número de átomos de cada elemento de tal manera que la masa asociada a la nueva fórmula coincida con la masa molecular. De nuevo, la mejor manera de entender lo anterior es a través de un ejemplo:

La espectrometría de masas muestra que la masa molar del etanol es 46.07. Por otro lado se determinó que la fórmula empírica de este compuesto era  $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$ .

La masa asociada a dicha fórmula empírica es:

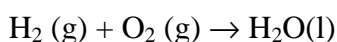
$$\text{Masa molar de } \text{C}_2\text{H}_6\text{O} = [2 \cdot \text{M}(\text{C}) + 6 \cdot \text{M}(\text{H}) + \text{M}(\text{O})] = (2 \cdot 12.01 + 6 \cdot 1.008 + 16.00) = 46.07$$

$$\frac{M(F.\text{Empírica})}{M(F.\text{Molecular})} = \frac{46.07}{46.07} = 1$$

En este caso la fórmula empírica y la molecular coinciden.

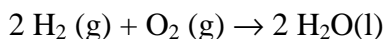
## **6. Ecuaciones químicas**

Una ecuación química es la manera de expresar lo que ocurre en una reacción química. Es decir que unos reactivos de alguna manera se transforman en unos productos. Para ello en la parte de la izquierda de la ecuación se escribe en forma de suma y mediante la utilización de símbolos las fórmulas asociadas a los compuestos o elementos que forman parte de los reactivos, después se escribe una flecha con sentido derecho indicando el sentido de la reacción (dos flechas en sentidos opuestos indican la presencia de un equilibrio químico) y por último en forma de suma se escriben los productos. Por otro lado se debe escribir también el estado en el que se encuentran tanto los reactivos como los productos; si es un gas, líquido, sólido o disolución acuosa se indicará por (g), (l), (s) o (ac) respectivamente. Por ejemplo, la reacción de hidrógeno con oxígeno para dar agua se expresaría mediante su ecuación química de la forma siguiente:



Por tanto una ecuación química es una expresión que muestra las fórmulas de los reactivos y los productos.

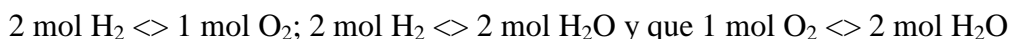
Para que la ecuación esté completa es necesario que esté ajustada, es decir que se cumpla la ley de conservación de la masa en las reacciones químicas. No es posible que la masa de reactivos sea diferente a la de productos. En caso de que estas masas no coincidan será necesario realizar un ajuste de la reacción. Para ello se añadirán los números (coeficientes estequiométricos) necesarios delante de las fórmulas de los reactivos y los productos que indicarán la proporción de ellos y que permitan finalmente ajustar la masa a ambos lados de la ecuación. Así en el caso de la ecuación química anterior será necesario poner un 2 delante de la molécula de hidrógeno y de la del agua indicando que 2 moléculas (o moles) de hidrógeno reaccionan con una molécula (o mol) de oxígeno para dar dos moléculas (o moles) de agua.



Por tanto una ecuación química está ajustada cuando el mismo número de átomos de cada elemento aparece a ambos lados de la flecha en la ecuación química.

## 7. Estequiometría

La interpretación cuantitativa de las reacciones químicas es la parte de la química denominada estequiometría. Como vimos anteriormente en una ecuación química el coeficiente estequiométrico nos indica la cantidad relativa (número de moles) de la sustancia que reacciona o es producida. Entonces, los coeficientes estequiométricos de la ecuación química anterior indican de manera resumida que:



El signo  $\diamond$  significa “químicamente equivalente a” y a estas expresiones se las denomina relaciones estequiométricas.

La estequiometría tiene importantes aplicaciones prácticas, como predecir qué cantidad de producto puede formarse en una reacción. Por ejemplo para determinar la masa de un

producto que puede formarse a partir de una masa conocida de reactivo, primero se convierten los gramos de reactivo en moles ( $n^\circ \text{ moles} = \text{masa de reactivo}/\text{masa molar}$ ), después a partir de la correspondiente relación estequiométrica se determina el número de moles de producto y por último se convierten los moles de producto en gramos (masa de producto =  $n^\circ \text{ moles de producto} \times \text{masa molar de producto}$ ).

Supongamos que disponemos de 20 gramos de hidrógeno y queremos calcular i) la masa de oxígeno necesaria para que todo el hidrógeno reaccione para dar agua y ii) la masa de agua obtenida en dicha reacción.

i) En primer lugar calculamos el  $n^\circ$  de moles de  $H_2$  en 20 g. Como la masa molar del  $H_2$  es 2, entonces:

$$n(H_2) = \frac{m(H_2)}{M(H_2)} = \frac{20(g)}{2(g \cdot mol^{-1})} = 10(mol)$$

Las relaciones estequiométricas nos dicen que:

2 mol  $H_2 \Leftrightarrow$  1 mol  $O_2$ ; 2 mol  $H_2 \Leftrightarrow$  2 mol  $H_2O$  y que 1 mol  $O_2 \Leftrightarrow$  2 mol  $H_2O$

Por lo que

$$n^\circ \text{ mol de oxígeno} = n(O_2) = (1/2) \cdot \text{mol de } H_2 = 10/2 = 5 \text{ mol}$$

$$\text{masa de } O_2 = m(O_2) = n(O_2) \times M(O_2) = 5 \text{ (mol)} \times 32 \text{ (g} \cdot \text{mol}^{-1}) = 160 \text{ g}$$

ii) Por último, como se consumen el mismo número de moles de  $H_2$  que los que se producen de  $H_2O$ , el número total de moles de agua producidos serán 10 y la masa será:

$$\text{masa de } H_2O = m(H_2O) = n(H_2O) \times M(H_2O) = 10 \text{ (mol)} \times 18 \text{ (g} \cdot \text{mol}^{-1}) = 180 \text{ g}$$

## 7.1. Reactivos limitantes

Los cálculos estequiométricos realizados anteriormente corresponden a reacciones ideales donde todos los reactivos se consumen para dar productos. Sin embargo, en muchas ocasiones esto no ocurre así, consumiéndose algún reactivo de manera parcial debido a la existencia de alguna otra reacción competitiva, porque la reacción no se haya completado cuando se realizaron las mediciones o simplemente porque la reacción no se completa al llegarse a una situación de equilibrio en la que los reactivos desaparecen para dar productos a una velocidad igual a la que los productos desaparecen para dar los reactivos.

Se define el rendimiento teórico de una reacción como la máxima cantidad (masa o volumen) de producto que puede obtenerse a partir de una cantidad de reactivo. El rendimiento porcentual es la fracción del rendimiento teórico realmente producida, expresada como porcentaje:

$$\text{Rendimiento porcentual} = \frac{\text{Rendimiento real}}{\text{rendimiento teórico}} \times 100$$

Un reactivo limitante en una reacción es el que determina el máximo rendimiento de producto. Para decidir cuál de los reactivos es el limitante, se compara el número de moles de cada reactivo suministrado con los coeficientes estequiométricos. Por ejemplo, supóngase que se encuentra disponible 3 moles de H<sub>2</sub> pero solamente un mol de O<sub>2</sub>. Debido a que esta cantidad de oxígeno es menor que la requerida por la reacción estequiométrica, el oxígeno sería el reactivo limitante. Una vez identificado el reactivo limitante, se puede calcular la cantidad de producto que puede formarse. También se puede calcular la cantidad de reactivo en exceso que queda al final de la reacción.