

Libros de **Cátedra**

Introducción a la química

Curso con estrategias alternativas
para la enseñanza de la Química CEAEQ

Laura E. Briand y Virginia Vetere (coordinadoras)

FACULTAD DE
CIENCIAS EXACTAS

e
exactas


EDITORIAL DE LA UNLP



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA

CURSO CON ESTRATEGIAS ALTERNATIVAS
PARA LA ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA CEAEQ

Laura E. Briand
Virginia Vetere
(coordinadoras)

Facultad de Ciencias Exactas



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA


Eduulp
EDITORIAL DE LA UNLP



**Dedicado a nuestrxs¹ estudiantes de la Facultad
de Ciencias Exactas que nos acompañaron en
la difícil implementación del CEAEQ**

¹ Lxs autores adoptan la posición política de utilizar lenguaje no sexista, reconociendo la amplia diversidad de identidades sexogenéricas.

Agradecimientos

De la autora Laura Briand: Agradezco a Benjamin y Jorge Gubkien, por ser la alegría y el propósito de mi vida y la motivación para llevar adelante todos mis proyectos. A mi madre y mi padre porque gracias a su esfuerzo pude acceder a un estudio universitario. A Nina por ser la compañera fiel de la familia.

De Virginia Vetere: agradezco a mi padre Vicente Vetere, destacado químico del área analítica, por ser mi inspiración y ejemplo de humildad y honestidad. Dedico este libro a su memoria.

A mi madre, mujer valiente, por el amor y la libertad.

A Gus, a mis amigxs y mis compañerxs, por compartir la vida.

De Sofía Sampaolesi: A David, por ser mi compañero en esta y otras aventuras, por la alegría de compartimos.

A la Mg. Silvina M. Justianovich, Silvi, por ser una excelente docente guía de otrxs docentes, por su cercano y dedicado acompañamiento durante la Especialización, por brindarse con tanto cariño a sus estudiantes.

A Fernanda, Ezequiel y Clelia, que tanto me cuidaron y me cuidan.

El autor Facundo Barraqué agradece el apoyo incondicional de su familia, su pareja y sus amigos en cada proyecto emprendido.

Lxs autores agradecen a Marilén Federico, Carla Di Tondo y Lucía Damia Rincón por su valiosa contribución con las ilustraciones que acompañan los conceptos volcados en este texto y hacen mucho más amena su lectura.

A la Profesora Celina Castuma y a la Dra. Hilda Weissmann por habernos impulsado la creación de un nuevo curso de introducción a la química y química general y repensar las metodologías de enseñanza.

Índice

Introducción _____ 8

Capítulo 1

¿Qué es la química? Origen e impacto en la sociedad _____ 11

Virginia Vetere

Capítulo 2

Unidades de medición _____ 21

Laura E. Briand

Capítulo 3

Nociones básicas de estructura de la materia _____ 28

Facundo Barraqué

Capítulo 4

Los compuestos: fórmulas y nomenclatura _____ 46

Laura E. Briand

Capítulo 5

Estructura y geometría molecular _____ 63

Laura E. Briand y Virginia Vetere

Capítulo 6

Estequiometría: relaciones cuantitativas entre reactivos y productos
en una reacción química _____ 84

Virginia Vetere y Facundo Barraqué

Capítulo 7

Soluciones _____ 105

Sofía Sampaolesi

Capítulo 8

Reacciones de oxidación–reducción _____ 130

Virginia Vetere

Capítulo 9

Comportamiento ideal de los gases _____ 146

Sofía Sampaolesi

Lxs autorxs _____ 174

Introducción

A nuestrxs estudiantes

Este libro fue pensado para acompañarlx en el estudio de la Química básica en la Universidad, por profesoras y docentes que llevan años en sus aulas y que esperan, a partir de su experiencia en este quehacer, haber generado un material que lxs motive a aprender.

Como docentes entendemos que el camino del aprendizaje es muy propio de cada estudiante y que nuestro rol es el de orientarlx hacia una autonomía en el estudio. Que sean ustedes quienes puedan evaluar “qué saben” y “cuánto lo saben” y que desarrollen las habilidades para ir en busca de aquel conocimiento que “todavía no” y las herramientas para elaborar aquello que “aún no comprendo”. Este rol como protagonistas de su propio aprendizaje, que consideramos es el mejor lugar para iniciarse como estudiantes universitarix, signó el desarrollo de todo este libro.

Podrán encontrar, al inicio de cada capítulo, lecturas que abordan temáticas de la vida cotidiana donde la química se hace presente para arrojar luz sobre algunos fenómenos por los que probablemente se hayan preguntado alguna vez. Esperamos que las encuentren interesantes y les inviten a indagar sobre por qué es importante estudiar y conocer aquello que el capítulo propone.

La naturaleza es un todo, y somos las personas quienes la dividimos y organizamos en disciplinas y subdisciplinas para poder abordar el estudio de tal inmensidad. Con esa impronta, organizamos una gran cantidad de modelos y teorías del campo de la química en núcleos temáticos o capítulos, que no son unidades estancas y aisladas, sino que dialogan entre sí y desarrollan nuevos conceptos a partir de otros abordados previamente. Del mismo modo, a medida que avances en el aprendizaje de la química, vas a comprobar que los distintos modelos que explican los comportamientos de la naturaleza son coherentes entre sí.

Los conceptos y marcos teóricos desarrollados a lo largo de los capítulos son aplicados en la resolución de ejercicios modelo. Lxs invitamos a leerlos con especial atención, reparando en la comprensión de cada paso y de cada “decisión” tomada en su resolución. En cada ejercicio, encontrarán una forma de analizar y buscar respuestas a las consignas planteadas que es sólo una de muchas estrategias posibles, quizás ustedes lo hubieran resuelto de otro modo. Insistimos fuertemente en que confíen en sus planteos y reflexiones, y en que utilicen estos ejercicios modelo como una guía, y de ningún modo como la norma.

También encontrarán ejercicios de aplicación, que les proponemos resolver a medida que avancen en la lectura y comprensión de los conceptos de cada capítulo. Fueron pensadas para generar nuevas preguntas a partir de las respuestas que brinden. Lxs convocamos a compartir

estas preguntas e inquietudes con sus compañerxs y docentes. Debatir sobre química nos mantiene aprendiendo química y promueve en nosotrxs el desarrollo de un espíritu crítico, esencial en la formación de futurxs profesionales de la ciencia.

Al igual que las lecturas iniciales, las actividades recorren diferentes ramas y aplicaciones de la disciplina: Química Ambiental, de los Alimentos, de Materiales, de Procesos Biológicos, entre otras. Muchas de ellas integran conceptos trabajados en el propio capítulo con otros estudiados en capítulos previos, dando cuenta de la interrelación que existe dentro de los temas de la química. Esperamos que les resulten motivadoras. Encontrarán todas las respuestas a las consignas al final de cada capítulo, para que puedan verificar sus resultados.

Entre las actividades, algunas proponen el uso de simuladores virtuales de acceso gratuito y lxs guían en la interacción con estas herramientas, muy útiles en la representación mental de nuevos modelos y conceptos. Otras, lxs invitan a realizar experimentos sencillos para recabar información a través de la observación detallada y reflexiva, como lo haría unx químicx en el laboratorio. Es nuestra intención que el análisis de los datos que registren les permita arribar a conclusiones y nuevos aprendizajes; en otras palabras, que vivencien la metodología fundamental a través de la cual la ciencia genera conocimiento: la observación metódica de los fenómenos naturales.

A lxs docentes

Este libro se escribió pensando en lxs estudiantes que ingresan a la Universidad. Al inicio de su trayecto académico, no sólo deben incorporar el contenido disciplinar curricular; en simultáneo, deben aprender el oficio de ser estudiantes. Esto implica el aprendizaje de nuevos ámbitos, con sus vocabularios y códigos, y de su rol en esos escenarios, con sus derechos y deberes. También abarca un aprendizaje, más paulatino y a un nivel menos consciente y palpable, de cómo estudiar y aprender al ritmo que impone la carrera universitaria y de ser autónomos en su proceso educativo. Es nuestra intención fundamental que este material acompañe a lxs estudiantes de primer año y a sus docentes en esta compleja etapa inicial.

Con esta mirada, se recorren los conceptos y modelos que hacen a la asignatura Introducción a la Química, describiendo los marcos teóricos necesarios sin abundar en aquellos cuya complejidad supera el nivel introductorio, que serán abordados y profundizados por lxs estudiantes en instancias más avanzadas de su trayecto académico.

Procuramos redactar un material ameno, para invitar a su consulta por parte de lxs estudiantes, acompañado de ilustraciones originales que hacen más sencilla la representación de nuevos conceptos. También incluimos ejercicios modelo, donde se plasman estrategias de resolución de problemas aplicando los conceptos y marcos teóricos presentados. A continuación de estos ejercicios, proponemos actividades para que lxs estudiantes desarrollen lo aprendido y continúen sacando conclusiones y conectando contenidos. Algunas de ellas utilizan simuladores de acceso gratuito de la Universidad de Colorado (EE. UU.) y el manual digital de laboratorio desarrollado

por lxs autorxs de este libro. Les invitamos a explorar estas herramientas, que encontramos sustanciales en su aporte a la representación mental de teorías y modelos por parte de lxs estudiantes y a su motivación para estudiar química. Al final de cada capítulo se encuentran las respuestas a las consignas planteadas en las actividades, de forma que lxs estudiantes reciban una retroalimentación inmediata.

También ocupadxs en promover el interés de estudiantes de una variedad de carreras, procuramos incluir lecturas iniciales a cada capítulo y actividades que muestren la ubicuidad de la química y la importancia de su estudio para el desenvolvimiento profesional en distintos escenarios laborales. Esperamos que esos textos sean disparadores de debates en el aula, entre estudiantes y con sus docentes, y que abonen al desarrollo de un espíritu crítico que oriente el estudio de la disciplina.

Entendemos al aula como el lugar de encuentro donde lxs docentes guiamos, orientamos y somos garantes de la gestión de un ambiente que propicia el desarrollo de una actividad creativa por parte de lxs estudiantes. En ella, lxs docentes promovemos canales de comunicación que habilitan la construcción y negociación de significados compartidos, y establecemos vínculos de respeto con sus estudiantes, favoreciendo su autoconcepto, autoestima y autonomía. Este libro se comunica con lxs estudiantes en ese clima, desde donde busca potenciar el trabajo en el aula. Esperamos les resulte una valiosa herramienta en su quehacer docente.

Sofía Sampaolesi

CAPÍTULO 1

¿Qué es la química? Origen e impacto en la sociedad

Virginia Vetere

En este capítulo describiremos brevemente cuáles fueron los orígenes de la rama de la ciencia que denominamos **Química** y qué es lo que en ella se estudia.

Compartiremos algunos aspectos acerca del rol que ha tenido y tiene la química en la construcción del conocimiento científico y tecnológico, en nuestra vida cotidiana y en el desarrollo de nuestra sociedad. Te mostraremos la importancia de esta ciencia en diversas disciplinas.

Haremos un breve recorrido por algunos de los aportes más significativos que han hecho las mujeres en la química y en áreas relacionadas.

Te invitamos a reflexionar sobre los temas abordados en este capítulo y sobre tu rol social como futurx profesional vinculadx a esta disciplina.

¿Qué es la química?

La química es la ciencia de la materia y sus transformaciones. Estudia la composición, la estructura y las propiedades de la materia, los cambios que ésta experimenta durante los procesos químicos y la energía puesta en juego en ellos.

La palabra **química** procede de *alquimia*, el nombre de un antiguo conjunto de prácticas que abarcaba diversas dimensiones de la química actual, además de otras disciplinas muy variadas como la metalurgia, la astronomía, la astrología, la filosofía, la medicina, y algunas vertientes del ocultismo y el esoterismo. La alquimia, practicada al menos desde alrededor del año 300, además de buscar la transmutación de metales en oro y plata, estudiaba la composición de las aguas, la naturaleza del movimiento, del crecimiento, de la formación de los cuerpos y su descomposición. Puede considerarse como un sistema de pensamiento filosófico y científico para interpretar los procesos de la naturaleza y el cosmos (Bribiesca y Robles, 2005). Unx alquimista solía ser llamado en lenguaje cotidiano “químicx”.

Se considera que los principios básicos de la química moderna surgen en el siglo XVII, a partir de la obra del químico irlandés Robert Boyle “*El químico escéptico*”, publicada en 1661. Un siglo después, se producen grandes avances que consolidaron esta ciencia del modo que hoy la conocemos gracias a los aportes realizados por el químico francés Antoine-Laurent de Lavoisier,

considerado el “padre de la química moderna”. Lavoisier descubrió en 1785 la ley de conservación de la masa (elaborada de forma independiente por el científico ruso Mijaíl Lomonósov en 1748) y estudió la participación del oxígeno en diferentes procesos, entre ellos la combustión (Robles y Bribiesca, 2005). Aunque a veces olvidada, Marie-Anne Pierrette Paulze, apodada “la madre de la química moderna”, trabajó junto a su esposo, Antoine-Laurent de Lavoisier, en los experimentos sobre la combustión que llevaron a refutar la teoría del flogisto, según la cual todo compuesto que puede combustionar contiene *flogisto*, una sustancia hipotética que representaba la inflamabilidad.

En la figura 1.1 se muestra, de manera simplificada, un recorrido histórico de las épocas que marcaron hitos en el desarrollo de la química.

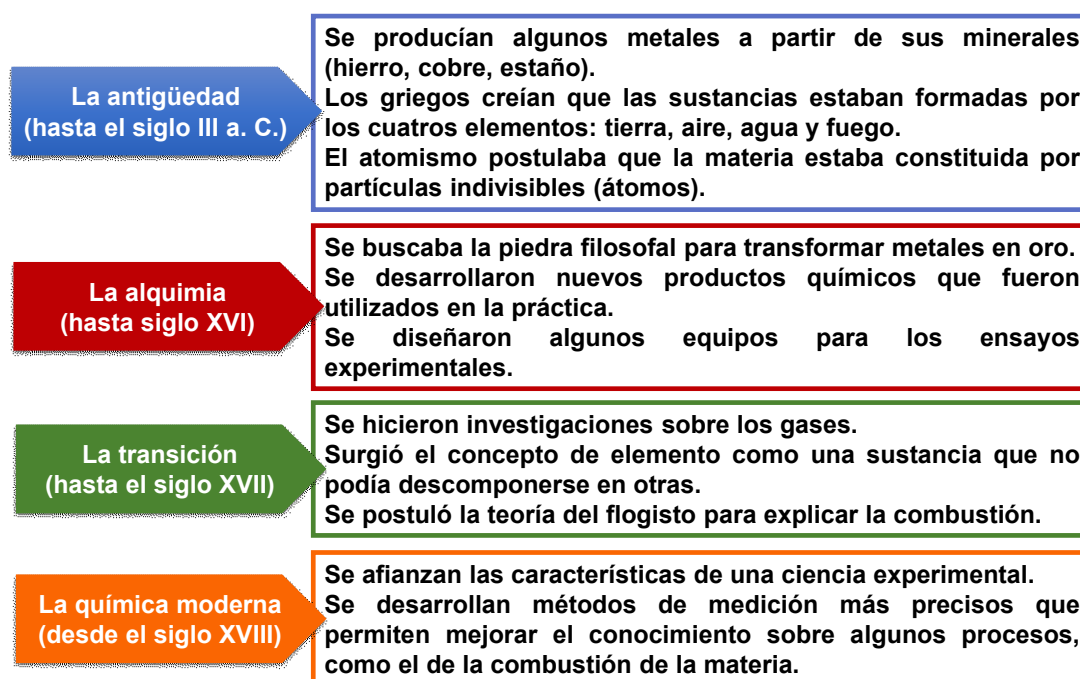


Figura 1.1. Hitos históricos en el desarrollo de la química

Los avances de la química y su impacto en la sociedad

La química es una ciencia fundamental en la que se sustenta la sociedad contemporánea. Todas nuestras actividades cotidianas se ven influenciadas en mayor o menor medida por ella. La Asamblea General de las Naciones Unidas proclamó el 2011 como “Año internacional de la Química” con el objetivo de enfatizar y difundir la contribución de la química como ciencia que puede dar respuesta a las necesidades del mundo, mejorando la calidad de vida y resolviendo los problemas esenciales de la humanidad, como el cambio climático, la alimentación, el agua, la salud y la energía, manteniendo un ambiente sano para el bienestar de todas las personas. Otros de los objetivos principales de esta conmemoración fueron celebrar las contribuciones

de las mujeres a esta ciencia y fomentar el interés de lxs jóvenes por ella. El 2011 fue elegido por ser el primer centenario del otorgamiento del Premio Nobel a Marie Skłodowska-Curie y de la creación de la Asociación Internacional de Sociedades Químicas (Asamblea General de la ONU, 2008).

Está fuera del alcance de este libro hacer una descripción detallada de todos los descubrimientos que han sido importantes en el desarrollo de la química. A continuación, describiremos brevemente algunos acontecimientos que provocaron grandes cambios en la humanidad. En este punto consideramos interesante reflexionar acerca de la construcción de conocimiento como herramienta que nos permite entender nuestro entorno, predecir su comportamiento, desarrollar nuevas formas de producción, mejorar la vida de las personas y habitar el mundo en armonía con el ambiente. El uso que han hecho de estos saberes los sectores que han ejercido el poder a lo largo de la historia determinó el modo en que ciertos descubrimientos esenciales han impactado en la sociedad.

Impacto de la química en el desarrollo pretecnológico

El primer cambio radical producido por la química en la vida de nuestra especie se produjo cuando lxs seres humanxs encendieron por primera vez el fuego. Algunxs investigadorxs ubican temporalmente el uso controlado del fuego hace 1.000.000 de años, otrxs consideran que las evidencias más contundentes datan de 500.000 años. Sin embargo, todxs coinciden en que esta práctica permitió a lxs personas cocinar sus alimentos, mejorando sus propiedades energéticas, digestivas y eliminando agentes patógenos, además de proveerlas de luz, calor y ahuyentar a sus predadores.

Los hitos en la historia de la química que siguieron a esta habilidad fundamental se produjeron en el período Neolítico con la introducción de la alfarería y alrededor del año 6.000 a. C., e incluso antes según algunxs antropólogxs, con la utilización del cobre y el comienzo de la metalurgia.

Desde el descubrimiento de la metalurgia hasta el inicio de la Revolución Industrial en el siglo XVIII, se produjeron avances significativos en la química, especialmente en el hallazgo de nuevos elementos químicos y en el empleo de fármacos para tratar enfermedades. Durante este período la alquimia se transformó en química y se descubrieron dos ácidos fundamentales para la industria moderna, el ácido nítrico y el sulfúrico. Sin embargo, el invento con mayor impacto social de este largo período fue la pólvora negra, descubierta en China en el siglo IX, para hacer fuegos artificiales y armas, y distribuida más tarde en Asia y Europa. En nuestro continente fue introducida por los colonizadores españoles y portugueses en el siglo XV.

La química en la mitad del siglo XVIII experimentó avances que cambiaron el mundo. Durante la Revolución Industrial, las formas de vida tradicionales basadas en la agricultura, la ganadería y la producción artesanal, se transformaron en otras sustentadas en la producción industrial y la mecanización. En este período de profundos cambios sociales, se desarrollaron dos procesos químicos muy importantes: la producción de ácido sulfúrico por el método conocido como de las

“cámaras de plomo” y la producción de carbonato de sodio por el método de Leblanc, que usaba precisamente este ácido. Probablemente, la disponibilidad de estos compuestos fue decisiva para el desarrollo de la industria textil y de la industria del vidrio, así como para las primeras fases de producción de superfosfatos y derivados y el incremento en la producción agrícola.

Impacto de la Química en la sociedad contemporánea

La Revolución Industrial produjo un incremento muy significativo en la población, con un crecimiento notable en las ciudades. La explosión demográfica ocurrida desde el siglo XIX hasta la fecha trajo aparejada la aparición de epidemias por efecto de patógenos y la necesidad de alimentación, acceso al agua potable y al saneamiento para gran cantidad de personas. El desarrollo de fármacos, la cloración masiva de las aguas, la depuración de las aguas residuales, la producción de grandes cantidades de alimentos, son algunos de los aspectos en donde la química ha hecho aportes fundamentales que contribuyeron al bienestar de la sociedad.

Química y salud

A fines del siglo XIX, la esperanza de vida media era de 35 años. La aplicación de la química a la farmacología permitió el desarrollo y producción de vacunas, antibióticos, antisépticos, analgésicos, antiinflamatorios, antitérmicos, antidepresivos y muchos otros medicamentos que redujeron notablemente los índices de mortalidad y mejoraron nuestra calidad de vida. Los insumos para una intervención quirúrgica (fármacos, jeringas, gases medicinales, guantes, bolsas para sangre y suero, instrumental, prótesis, etc.) se producen con materiales provenientes de investigaciones y desarrollos en el área de la química. Se estima que más de 50 millones de personas en todo el mundo tienen implantado algún tipo de prótesis fabricadas con polímeros y aleaciones especiales de base química.

En la actualidad estamos atravesando la pandemia producida por la Covid-19 (enfermedad por coronavirus de 2019, cuyas siglas provienen del inglés *coronavirus disease 2019*). Gracias a los conocimientos generados en el área de química, y de todas las disciplinas relacionadas, ha sido posible el desarrollo y producción de las vacunas contra el virus que causa esta enfermedad, SARS-CoV-2, así como de diversas pruebas de detección del mismo. Hasta el día de hoy, se continúan haciendo grandes esfuerzos en la investigación de fármacos y tratamientos específicos para afrontar esta enfermedad.

De este modo, en los últimos 100 años, la química aplicada a la salud ha duplicado nuestra esperanza de vida. Se espera que, en un futuro próximo, los avances en esta ciencia permitan producir medicamentos para la prevención y cura de enfermedades que aún no cuentan con tratamiento, así como el desarrollo de nuevos materiales con aplicaciones que resultan difíciles de imaginar. La nanotecnología, manipulación de la materia a escala nanométrica, seguirá avanzando en el diseño de biosensores para medir con precisión parámetros químicos y bioquímicos, en el transporte de medicamentos hacia zonas específicas y en liberación controlada de fármacos, entre otras aplicaciones.

Química y alimentación

Se estima que la población mundial aumenta diariamente en aproximadamente 240000 personas. Para obtener alimento en grandes cantidades, el modelo productivo imperante utiliza agentes químicos que permiten mejorar el rendimiento de las cosechas y evitar las enfermedades de los animales que se consumen (agroquímicos, fitosanitarios, fertilizantes, fármacos zoonos, etc.). La Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura (FAO) prevé que en los próximos años el nivel de las cosechas se debe incrementar por un factor de seis para cubrir las necesidades de la población mundial. Algunos especialistas consideran que el uso de plaguicidas (insecticidas, fungicidas, rodenticidas, etc.) es necesario para obtener este incremento. Sin embargo, el uso de estos compuestos químicos está cuestionado por varios sectores de la sociedad. En los últimos años se han hecho grandes avances en el desarrollo y utilización de los denominados bioinsumos, productos de origen biológico, elaborados a partir de organismos benéficos tales como bacterias, hongos, virus, e insectos, como así también de extractos naturales obtenidos de plantas, y que pueden ser utilizados para promover el crecimiento vegetal y para controlar las plagas. La producción de bioinsumos es una alternativa importante para el desarrollo de una agricultura sostenible, preservando los recursos naturales y el ambiente. Este es uno de los aspectos de la denominada transición agroecológica, una forma de producción agrícola que está teniendo cada vez mayor impulso en nuestra región y en el mundo (Ferraris, Mónaco y Marasas, 2018).

La química también aporta a la alimentación en el uso de diferentes aditivos, como los conservantes, que prolongan el período en que los alimentos mantienen su calidad de comestibles habilitando su distribución y comercialización en lugares alejados de los sitios de producción. Además, proporciona los gases criogénicos que permiten el transporte y almacenamiento de alimentos en cámaras frías preservando sus propiedades. Asimismo, provee de los plásticos para envases y embalajes que protegen los productos alimenticios. En los últimos años se han desarrollado gran cantidad de materiales biodegradables que permiten minimizar los daños ambientales de la acumulación de residuos plásticos y no degradables (Iqbal y colaboradores, 2019).

Química y agua

El agua, fuente y origen de la vida, es un recurso básico para la salud y la alimentación. En la actualidad, la contaminación, el aumento de la población, las crecientes demandas de la agricultura y la industria y los impactos del cambio climático están poniendo en riesgo el acceso al agua potable. Desde la química se han hecho importantes aportes a esta problemática que presenta aún grandes desafíos.

La Asamblea General de las Naciones Unidas en 2010 ha reconocido el acceso al agua y al saneamiento como un derecho humano. El cloro y otros productos permiten potabilizar el agua evitando el contagio de enfermedades cuando se la consume. Asimismo, la investigación y desarrollo sobre procesos de producción menos contaminantes tienen su base en esta ciencia. La

química aporta, además, diversos métodos para el tratamiento de efluentes industriales y el saneamiento de aguas residuales, fundamental para la prevención de numerosas enfermedades que sufren millones de personas en el mundo y para la salud ambiental.

Otras aplicaciones de la química

Los compuestos químicos son indispensables en casi todas las áreas de nuestra vida. Los productos de higiene personal (jabón, champú, pasta dental, cremas y diversos productos cosméticos) y de los espacios que habitamos (desinfectantes, detergentes, desengrasantes, aromatizantes, etc.) posibilitan el desarrollo de nuestras actividades en forma segura e higiénica.

En el transporte, se utilizan combustibles, lubricantes, cauchos, pinturas, polímeros, entre otros productos químicos. La química ha permitido el desarrollo de nuevos materiales y formulaciones de combustibles para hacer al transporte más eficiente y ecológico. El *airbag*, elemento de seguridad que reduce el riesgo de muerte ante un impacto en un 30 %, está fabricado con una fibra sintética de nylon que, mediante un detector activa su inflado debido a una reacción entre boro y nitrato de sodio que produce una gran cantidad de nitrógeno en centésimas de segundo.

En el deporte, la indumentaria, el arte, la construcción y las nuevas tecnologías la química ha permitido reemplazar los materiales tradicionales por otros más livianos, resistentes y que impacten menos sobre el ambiente (Foro Química y Sociedad, 2011).

Contribución de las mujeres a la química

Durante toda la historia de la humanidad las mujeres han hecho importantes aportes a la ciencia a través de sus investigaciones y descubrimientos vanguardistas, que, en la mayoría de los casos, fueron subestimados o apropiados por otros científicos. La desigualdad de género se hace presente en la ciencia con la misma fuerza que en otras dimensiones de nuestra sociedad. A continuación, presentaremos algunas de las mujeres que han hecho contribuciones fundamentales para el desarrollo de la química (ONU MUJERES, 2020; Pérez, 2021; Mujeres Químicas, 2021). ¿A cuántas de ellas conocés?

María La Jueva: conocida también como María la Judía, María la Hebrea o Miriam la Profetisa. Nacida en Alejandría entre el siglo I y el III, es considerada la primera mujer alquimista. Inventó sofisticados aparatos de destilación y sublimación. Fue la creadora del procedimiento de calentamiento de sustancias de manera uniforme conocido popularmente como “baño (de) María”.

Isabella Cortese: química/alquimista nacida en Italia en siglo XVI. Escribió el libro “Los secretos sobre Alquimia” que constaba de explicaciones sobre remedios para diversas enfermedades, ácidos y cosmética.

María Le Jars: nacida en París en 1565, fue una alquimista autodidacta y defensora del acceso al conocimiento por parte de las mujeres. Escribió entre otros libros, “Igualdad entre hombres y mujeres” en 1622 y “Agravio de las mujeres” en 1626.

Marie Meurdrac: nacida en París en 1687. Fue la primera mujer en escribir un libro de química “La química comprensible y fácil a favor de las damas”. Con este libro de divulgación desafió los mandatos de la época, quedando evidenciado en sus propias palabras “estuve indecisa de publicarlo, ya que la enseñanza no era profesión de mujer, que debería estar callada, escuchar y aprender, sin desplegar sus conocimientos”.

Elizabeth Fullhame: química escocesa nacida en siglo XVII. Realizó importantes experimentos sobre la combustión que plasmó en su escrito “Ensayos sobre la combustión”, en 1794. Fue miembro honorario de la Sociedad Química de Filadelfia.

Marie-Anne Pierrette Paulze: apodada como “la madre de la química moderna”. Nació en Francia en 1758. Fue investigadora, ilustradora y co-autora del “Tratado de química de Lavoisier”, considerado el primer libro de la ciencia química.

Jane Marcet: destacada investigadora y divulgadora, nacida en Ginebra en 1769. Escribió varios libros, entre ellos “Conversaciones sobre química”, publicado en forma anónima en 1805, que recopila un diálogo informal entre una profesora y sus alumnas acerca de grandes descubrimientos de la época.

Marie Sklodowska-Curie: física y química nacida en Polonia en 1867. Fue pionera en estudios sobre la radiactividad. Sentó las bases para la ciencia nuclear moderna, desde los rayos X hasta la radioterapia para el tratamiento del cáncer. Fundó un instituto de investigación médica en Varsovia e inventó unidades móviles de rayos X que ayudaron a más de un millón de soldados heridos en la Primera Guerra Mundial. Fue la primera mujer en ganar un premio Nobel y la primera persona en obtener dos premios Nobel en distintas ciencias. En 1903 se le otorgó el premio Nobel de Física, junto a su marido Pierre Curie, y en 1911 ganó el premio Nobel de Química.

Irene Joliot-Curie: hija de Marie Sklodowska-Curie, nació en París en 1897. Junto a su marido Federico Joliot, descubrió la radiactividad artificial y obtuvo el premio Nobel de Química en 1935. Fue directora del Instituto de Radio y la Comisión de Energía Atómica de Francia.

Dorotea Barnés González: química española nacida en 1904. Se destacó por sus estudios sobre técnicas espectroscópicas aplicadas al análisis químico. Su trabajo de investigación fue clave para la incorporación de técnicas como espectroscopia Raman en su país.

Dorothy Crowfoot-Hodgkin: química británica nacida en 1910. Se especializó en cristalografía de biomoléculas. Entre sus descubrimientos más importantes se encuentran la confirmación de la estructura de la penicilina. En 1964 recibió el premio Nobel de Química por determinar la estructura de la vitamina B12. Otros de sus descubrimientos fueron la estructura de la insulina, el colesterol y el calciferol (vitamina B2).

Kamala Sohoni: física y química, nacida en India en 1912. Se convirtió en la primera mujer india en obtener un doctorado en una disciplina científica. Sus investigaciones se enfocaron en el valor nutricional de los alimentos consumidos por los sectores más pobres de su país, ayudando a remediar las carencias nutricionales.

Rosalind Franklin: nacida en Inglaterra en 1920, fue una de las químicas más influyentes del siglo XX. Experta en el uso de los rayos X, reveló la estructura helicoidal de la molécula del ADN. Esa investigación fue utilizada por el científico estadounidense James Dewey Watson y el británico Francis Harry Compton Crick, para la célebre hipótesis de la "doble hélice". En 1962 estos investigadores recibieron, junto con Maurice Wilkins, el premio Nobel en Fisiología y Medicina. Los aportes fundamentales de Rosalind Franklin al modelo de la doble hélice no le fueron reconocidos en vida.

Marie Maynard Daly: nacida en Estados Unidos en 1921, fue la primera mujer afroamericana en obtener un doctorado en química en ese país. Realizó grandes contribuciones a la ciencia a través de sus estudios sobre los efectos en el corazón y las arterias de factores como el envejecimiento, el tabaquismo, la hipertensión o el colesterol. En 1999 fue reconocida como una de las 50 mejores mujeres en ciencia, ingeniería y tecnología.

Stephanie Kwolek: química estadounidense nacida en 1923. Fue pionera en el estudio de los materiales poliméricos e inventora de una fibra sintética conocida como Kevlar®, que puede ser hasta diez veces más resistente que el acero y que en la actualidad es utilizada en la elaboración de chalecos antibalas. Esta fibra tiene aplicación en diversas áreas, como la construcción y la ingeniería aeroespacial.

To YouYou: química china, especializada en el área farmacéutica, nacida en 1930. Gracias a su descubrimiento para el tratamiento de la malaria ha salvado miles de vidas. Luego de muchos años de investigación, y sobre la base de estudios de una planta utilizada por la milenaria medicina china, el ajeno dulce, Yoyou y su equipo de trabajo extrajeron un compuesto denominado artemisinina, que reduce los parásitos que se encuentran en la sangre de los pacientes con malaria. En 2015 recibió el premio nobel de Fisiología y Medicina, junto a otros dos investigadores, convirtiéndose en la primera mujer china que recibió este galardón.

El aporte de las mujeres a la ciencia y el número de científicas prestigiosas en todo el mundo y en todas las disciplinas es tan importante que sería imposible abarcarlo en un libro introductorio de química. Con esta pequeña selección de químicas destacadas pretendemos visibilizar una parte de la historia de esta ciencia que, tal vez, no nos ha sido contada.

Compromiso social y ambiental

Durante este capítulo hemos recorrido brevemente los principales aportes que la química ha hecho a la humanidad a lo largo de la historia. Esta ciencia contribuyó con importantes conocimientos, que aumentaron de forma exponencial en las últimas décadas, y que cambiaron el mundo y mejoraron la calidad de vida de las personas. Sin embargo, no podemos ignorar que algunos logros científicos y tecnológicos han producido efectos negativos sobre el ambiente, entendido éste de una forma amplia, como el conjunto de elementos naturales y sociales y sus relaciones. El cambio climático, la degradación de la biodiversidad, la contaminación de las aguas, los efectos sobre la salud de las personas, la desigualdad social, la vulneración de los derechos humanos, son algunas de las consecuencias no deseadas y en la que debemos trabajar intensamente para remediarlas.

Las personas vinculadas a la química tenemos el desafío de trabajar en dar respuesta a las principales necesidades del mundo, contribuyendo a mejorar la calidad de vida de las personas y de la sociedad en su conjunto. Lamentablemente, gran parte de la población mundial es vulnerada en sus derechos. En la actualidad, se estima que 690 millones de personas en el mundo padecen hambre (aproximadamente el 9 % de la población), 2000 millones de personas no dispone de acceso regular a alimentos inocuos, nutritivos y suficientes, 2200 millones de personas carecen de acceso a agua potable y 4200 millones de personas (más de la mitad de la población mundial) a servicios de saneamiento (WHO/UNICEF 2017; OMS/UNICEF; 2019, Naciones Unidas, 2021). Es obligación de los estados garantizar estos y otros derechos. Desde la química podemos hacer grandes aportes en la generación de herramientas y estrategias que promuevan la equidad y favorezcan modelos productivos inclusivos y que preserven el ambiente. Es nuestra responsabilidad, individual y colectiva, hacer que esto ocurra.

Referencias

- Asamblea General de la ONU (2008). *Resolución aprobada por la Asamblea General sobre la base del informe de la Segunda Comisión (A/63/414 y Corr.1) 63/209. Año Internacional de la Química*. Recuperado de <https://www.un.org/es/events/chemistry2011/resolution.shtml>
- Bribiesca, L. y Robles, J. (2005). *En Busca de la Piedra Filosofal: O ¿Debería Todo Químico Moderno Saber Algo de Alquimia? Parte I: La Alquimia como Sistema de Pensamiento*. Educación Química, Número extraordinario 16(4e) 199-207.
- Ferraris, G., Mónaco, C. I., Marasas, M. E. (2018). La transición agroecológica en sistemas intensivos. Validando tecnologías en el cinturón hortícola platense. X Congreso de la Asociación Latinoamericana de Sociología Rural (ALASRU). ISBN: 978-9974-8434-8-6
- Foro Química y Sociedad (2011). *Tienes química, tienes vida*. Editorial Química y sociedad. España. Recuperado de <https://www.quimicaysociedad.org/libros/tienes-quimica-tienes-vida/>
- Iqbal, N., Khan, A.S., Asif, A., Yar, M., Haycock, J. W., Rehman, I. U. (2019). Recent concepts in biodegradable polymers for tissue engineering paradigms: a critical review. *International Materials Reviews*, 64(2) 91-126.
- Mujeres químicas (2021). *Observatorio de la Igualdad de la Universidad Rovira i Virgili*. Recuperado de <https://www.urv.cat/es/vida-campus/universidad-responsable/observatorio-igualdad/ano-mujeres-ciencias/dones-i-ciencias/dones-quimiques/>
- Naciones Unidas (2021). Desafíos globales. Alimentación. Recuperado de <https://www.un.org/es/global-issues/food>
- OMS/UNICEF (14 de junio de 2019). Agua. Recuperado de <https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/drinking-water>
- ONU Mujeres (7 de febrero de 2020). Dedicación por el descubrimiento: siete mujeres científicas que formaron el mundo. Recuperado de <https://www.unwomen.org/es/news/stories/2020/2/compilation-seven-women-scientists-who-shaped-our-world>

- Pérez, J.I. (2021). *Mujeres con ciencia*, Cátedra de Cultura Científica de la Universidad del País Vasco. ISSN 2529-900X. Editado por Macho-Stadler, M. Recuperado de <https://mujeresconciencia.com/mujeres-con-ciencia/>
- Robles, J. y Bribiesca, L. (2005). En busca de la Piedra Filosofal: O ¿debería todo químico moderno saber algo de alquimia? Parte II: Historia de la alquimia como búsqueda de conocimiento y práctica. *Educación Química*, 16(2), 338-346.
- WHO/UNICEF (febrero de 2017). Seguimiento del suministro de agua, el saneamiento y la higiene. Recuperado de https://www.who.int/water_sanitation_health/monitoring/coverage/es/

CAPÍTULO 2

Unidades de medición

Laura E. Briand

En este capítulo nos proponemos presentarte los conocimientos básicos para comprender la importancia y la finalidad de las mediciones y su correcta expresión, realizar cálculos sencillos de conversión de unidades y distinguir entre propiedades intensivas y extensivas. Antes de comenzar, te has preguntado ¿a qué llamamos “medir”? ¿conocés sistemas internacionales de medida? ¿cuáles?, ¿pensás que siempre una medida es exacta? ¿por qué? ¿podrías dar un ejemplo?, ¿cómo se mide el calor? ¿y la temperatura?, ¿el peso y la masa de un objeto se refieren a la misma magnitud? Te proponemos que pienses en estas preguntas y las discutas con tus compañerxs y docentes.

Lectura inicial

Actualmente, coexisten diferentes sistemas de medidas en el mundo, por ejemplo, en Estados Unidos se utiliza cotidianamente la milla para medir distancias, mientras en Argentina se usa el metro. Por ello, para que puedan compararse medidas tomadas por distintas personas de diferentes lugares del mundo, se acordó la adopción del denominado Sistema Internacional de Medidas (SI) en todos los países.

En Argentina, el 2 de marzo de 1972 se adoptó el denominado Sistema Métrico Legal Argentino (SIMELA), que coincide con el Sistema Internacional de Medidas (<http://www.saij.gob.ar>). La Tabla 2.1 muestra algunas de las unidades fundamentales de este sistema.

Como se observa en la tabla, la unidad de masa adoptada por el SIMELA es el kilogramo. ¿En qué se diferencia la masa de un cuerpo de su peso? Todxs sabemos que al soltar un objeto que sostenemos con la mano, se cae. Si preguntamos por qué se cae, a menudo escuchamos que es “**por la ley de la gravedad**”. Esta ley fue formulada por Isaac Newton; según cuenta la leyenda, cuando estando sentado a la sombra de un manzano observó cómo caían las manzanas. La explicación de este hecho es que debe actuar alguna fuerza sobre el objeto que lo hace caer.

Tabla 2.1. Unidades fundamentales del SIMELA

Propiedad física	Unidad	Símbolo de la unidad
Longitud	metro	m
Masa	kilogramo	kg
Tiempo	segundo	s
Corriente Eléctrica	ampere	A
Temperatura Termodinámica	Kelvin	K
Cantidad de Materia	mol	mol
Intensidad Luminosa	candela	cd

Newton descubrió que entre dos cuerpos cualesquiera siempre existe una fuerza de atracción, que recibe el nombre de fuerza gravitatoria. De aquí surge el concepto de peso de un cuerpo:

“El peso de un cuerpo en un lugar determinado de la Tierra, es la fuerza de atracción que ejerce la Tierra sobre él”

El peso y la masa son magnitudes distintas. La masa es una medida de la cantidad de materia de un cuerpo y es una constante propia del mismo. El peso, en cambio, es una fuerza y varía ligeramente con el lugar de la Tierra donde se mida.



Figura 2.1. Isaac Newton (1643- 1727). Físico, filósofo, teólogo, inventor, alquimista y matemático inglés. Entre sus descubrimientos científicos se destacan: la ley de la gravitación universal y el establecimiento de las bases de la mecánica clásica, los trabajos sobre la naturaleza de la luz y la óptica, y el desarrollo del cálculo matemático.

En la actualidad se hacen grandes esfuerzos científicos y tecnológicos para desarrollar materiales más ligeros para diversas aplicaciones. Un ejemplo son los compuestos reforzados con nanotubos de carbón, que podrían reducir en un 30 % la masa de un vehículo espacial. Los nanotubos de carbón tienen diámetros de 0,7 a 50 nanómetros y longitudes generalmente de decenas de micrones.

Unidades de medición fundamentales y compuestas

Las unidades de medición fundamentales del SIMELA a su vez pueden combinarse para expresar una unidad compuesta. Por ejemplo, la unidad de volumen en el SI es el metro cúbico (m^3) porque,

$$\text{Volumen} = \text{metro} \times \text{metro} \times \text{metro} = m^3$$

La densidad de un material es el cociente entre la masa y su volumen ocupado,

$$\text{Densidad} = \frac{\text{masa}}{\text{volumen}} = \frac{kg}{m^3}$$

Una propiedad más compleja es la presión, ya que se define como la fuerza aplicada sobre un área y, a su vez, tanto la fuerza como el área son unidades compuestas. Veamos cada una de ellas en detalle. La fuerza se define como el producto de la masa por la aceleración y a su vez la aceleración es el cociente entre la velocidad (¡también es una propiedad compuesta!) y el tiempo, entonces:

$$\text{aceleración} = \frac{\text{velocidad}}{\text{tiempo}} = \frac{\frac{\text{longitud}}{\text{tiempo}}}{\text{tiempo}} = \left[\frac{\frac{\text{metro}}{\text{segundo}}}{\text{segundo}} \right] = \frac{m}{s^2}$$

$$\text{Fuerza} = \text{masa} \times \text{aceleración} = kg \frac{m}{s^2} = \text{Newton (N)}$$

Entonces, un Newton (N) es la fuerza que, aplicada a un cuerpo de un kilogramo, le comunica una aceleración de un metro por segundo cuadrado.

Ahora estamos en condiciones de determinar la unidad de presión,

$$\text{Presión} = \frac{\text{fuerza}}{\text{área}} = \left[\frac{\text{Newton}}{\text{metro} \times \text{metro}} \right] = \left[\frac{\text{Newton}}{m^2} \right] = \text{Pascal (Pa)}$$

Un Pascal (Pa) es la presión que ejerce una fuerza de un Newton sobre una superficie (o área) de un metro cuadrado.

Existen otras unidades de longitud como el angstrom (Å) y el nanómetro (nm) que son muy importantes para expresar las propiedades de la materia a nivel atómico y de las ondas electromagnéticas. Un angstrom equivale a 1×10^{-10} metros (0,0000000001 metro) y un nanómetro es igual a 1×10^{-9} metros (0,000000001 metro).

La unidad del SIMELA para la cantidad de materia es el “*mol*” (tabla 2.1). Un mol contiene exactamente $6,02214076 \times 10^{23}$ entidades elementales. Una entidad elemental puede ser un átomo, una molécula, un ion, un electrón, o cualquier otra partícula o grupo específico de partículas. El número de entidades por mol, $6,02214076 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$, se denomina constante o número de Avogadro N_A . Esta constante se utiliza para hacer la conversión entre el número de moles y el número de átomos, iones o moléculas en esa cantidad.

Calor y temperatura

El calor es la energía que se transfiere entre dos sistemas materiales (o bien entre dos o más zonas de un mismo sistema material) siempre que exista una diferencia de temperatura. El calor fluye desde la zona más caliente hacia la más fría hasta que se alcanza el equilibrio térmico, es decir, hasta que todo el sistema alcanza la misma temperatura. Como sabemos, la temperatura se mide con un termómetro, sin embargo, este instrumento no puede medir el calor.

En la Tabla 2.1 se observa que la unidad del SI para la temperatura es el Kelvin (el símbolo es K). La unidad de temperatura termodinámica se definió en 1954 durante la décima Conferencia General de Pesos y Medidas (CGPM) que seleccionó el punto triple del agua como el punto fijo fundamental y le asignó la temperatura de 273,16 K (SI Brochure, 2008). Posteriormente, en la decimotercera CGPM (1967/68) se adoptó el nombre Kelvin, símbolo K, en lugar de “grado Kelvin” y se definió la unidad de temperatura termodinámica de la siguiente manera:

“El Kelvin, unidad de temperatura termodinámica, es la fracción 1 / 273,16 de la temperatura termodinámica del punto triple del agua”

La temperatura termodinámica del punto triple se había establecido en 273,16 K; entonces se deduce que un Kelvin posee la misma magnitud que un grado Celsius.

Para expresar la temperatura termodinámica se adopta el símbolo T, para diferenciarla de la temperatura de la fusión del hielo ($T_0 = 273,15 \text{ K}$) que se considera como referencia al definir las escalas de temperatura. La diferencia entre T y T_0 se denomina temperatura Celsius, simbolizada con la letra “t” y que se calcula con la ecuación:

$$t = T - T_0$$

La unidad de temperatura Celsius es el grado Celsius, °C, que es por definición igual en magnitud al Kelvin como se expresó anteriormente. Una diferencia o intervalo de temperatura puede expresarse en Kelvin o en grados Celsius ya que el valor numérico de la diferencia de temperatura es el mismo. Sin embargo, el valor numérico de una temperatura expresado en grados Celsius está relacionado con el valor numérico de la temperatura termodinámica expresado en Kelvin por la relación:

$$t (^{\circ}\text{C}) = T (\text{K}) - 273,15$$

A partir del año 2019, la Oficina Internacional de Pesas y Medidas redefinió el Kelvin para independizarlo del punto triple del agua. En definitiva, la medición del punto triple es una medida experimental que, por lo tanto, puede tener incertidumbre en su determinación por la presencia de impurezas (Peruzzi A., 2018). En la actualidad, el Kelvin se define tomando el valor numérico de la constante de Boltzmann k como $1,380649 \times 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$. Por lo tanto, un Kelvin es igual al cambio de temperatura que resulta en un cambio de energía térmica de $1,380649 \times 10^{-23} \text{ J}$ (joule). La unidad de energía denominada joule es igual a: $1 \text{ J} = \frac{\text{kg m}^2}{\text{s}^2}$

Propiedades de la materia

Las **propiedades físicas** de una sustancia son las características que se pueden observar o medir sin cambiar la identidad de la sustancia. Por ejemplo, una propiedad física de una muestra de agua es su masa; otra es su temperatura. Las propiedades físicas incluyen características como el punto de fusión, la dureza, el color, el estado de la materia (sólido, líquido o gaseoso) y la densidad. Las **propiedades químicas** se refieren a la capacidad de una sustancia de transformarse en otra. Por ejemplo, una propiedad química del gas hidrógeno es que reacciona con oxígeno para producir agua; una propiedad química del metal cinc es que reacciona con los ácidos para producir el gas hidrógeno. Cuando una sustancia sufre un **cambio físico**, la identidad de la sustancia no se altera. Por ejemplo, cuando el agua se congela, el hielo sólido es aún agua. Sin embargo, cuando una sustancia sufre un **cambio químico** se transforma en una sustancia diferente.

Las propiedades también se clasifican de acuerdo con su dependencia de la cantidad de materia del sistema. Una **propiedad extensiva** es aquella que depende de la masa de la muestra. Más precisamente, si un sistema está dividido en partes y se encuentra que la propiedad del sistema completo tiene un valor que es la suma de los valores de la propiedad de todas las partes, entonces la propiedad es extensiva. Si ese no es el caso, entonces la propiedad es intensiva. En resumen, una **propiedad intensiva** es independiente de la masa de la muestra. La importancia de la distinción es que identificamos sustancias diferentes por sus propiedades intensivas. Por lo tanto, podríamos reconocer una muestra de agua pura al notar su color, su densidad (1 g/cm^3 a 4°C y 1 atm), su punto de fusión normal (0°C o $273,15 \text{ K}$), su punto de ebullición normal (100°C) y por el hecho de que es un líquido en condiciones ambientales.

También sabemos que la mayoría de las propiedades dependen del estado de la materia y de condiciones como temperatura y presión. Por ejemplo, la densidad del agua a 4°C es de $1,00 \text{ g/cm}^3$, pero a 100°C es de $0,96 \text{ g/cm}^3$.

Ejercicio propuesto 2.1.

- a) ¿Qué propiedad física se mide en nanómetros y micrómetros? ¿Cómo se simbolizan? Convertí 50 nanómetros a metros, centímetros y micrones.
- b) En el texto introductorio de este capítulo, leemos: “los compuestos reforzados con nanotubos de carbón que podrían reducir en un 30 % la masa de un vehículo espacial”. ¿Por qué se utiliza el término “masa” y no “peso” para un objeto en el espacio?
- c) Calculá el volumen de un nanotubo de carbón cilíndrico de 50 nanómetros de diámetro y 15 micrómetros de longitud. ¿El volumen es una magnitud fundamental o derivada de otras magnitudes fundamentales? ¿Por qué?

Ejercicio propuesto 2.2.

Identificar si los siguientes procesos y metodologías utilizadas en el laboratorio constituyen cambios químicos o cambios físicos: molienda de FeSO_4 en mortero; oxidación de una granalla de cinc; concentración de una solución por evaporación de una parte del solvente; precipitación de ion plata por agregado de cloruros y formación de $\text{AgCl}(s)$; solubilización de una sal en agua destilada por calentamiento; solubilización de una sal en agua destilada por agitación; producción de un gas al mezclar dos soluciones.

Respuestas de los ejercicios propuestos**Ejercicio propuesto 2.1.**

- a) La propiedad física que se mide en nanómetros (simbolizado “nm”) y micrómetros (simbolizado “ μm ”) es la longitud de un objeto.
 $50 \text{ nm} = 5 \times 10^{-8} \text{ m} = 5,0 \times 10^{-6} \text{ cm} = 0,05 \mu\text{m}$
- b) Se utiliza el término masa del vehículo espacial porque en el espacio no existe la fuerza de gravedad.
- c) El volumen (V) de un cilindro se calcula con la ecuación:

$$V = \pi (\text{radio})^2 \text{ longitud}$$

$$V = \pi \left(\frac{50 \text{ nm}}{2}\right)^2 15 \mu\text{m} \left(\frac{1 \times 10^{-6} \text{ m}}{1 \mu\text{m}}\right) \left(\frac{1 \text{ nm}}{1 \times 10^{-9} \text{ m}}\right) = 2,945 \times 10^7 \text{ nm}^3$$

El volumen es una magnitud derivada de la longitud. Según podemos apreciar en la ecuación, el volumen del cilindro deriva del radio y la longitud del objeto.

Ejercicio propuesto 2.2.

Cambio físico	Cambio químico
-Molienda de FeSO_4 en mortero. -Concentración de una solución por evaporación de parte del solvente. -Solubilización de una sal en agua destilada por calentamiento. -Solubilización de una sal en agua destilada por agitación.	-Oxidación de una granalla de cinc. -Precipitación de ion plata por agregado de cloruros y formación de AgCl(s) . -Producción de un gas al mezclar dos soluciones.

Referencias

Peruzzi, A. (2018). On the redefinition of the Kelvin. *Journal of Physics: Conference Series*, 1065 (12) 122011.

SI Brochure (2008). The International System of Units (SI), Bureau International des Poids et Mesures, 8th edition, p. 113.

CAPÍTULO 3

Nociones básicas de estructura de la materia

Facundo Barraqué

Los objetivos de este capítulo están enfocados en analizar los experimentos que aportaron al conocimiento de la estructura de la materia, haciendo un recorrido por algunos modelos que buscaron representar la estructura del átomo a lo largo de la historia. Este análisis nos permitirá interpretar cómo está compuesta la materia en base a uno de los modelos actualmente aceptados, analizar la organización de los elementos químicos en la tabla periódica y establecer comparaciones entre magnitudes de características macroscópicas y microscópicas. En el transcurso del capítulo, estudiaremos ejemplos concretos de cómo la ciencia utiliza nociones previamente descriptas para el desarrollo de nuevas hipótesis e ideas, generando así conocimiento sustentado a través del método científico como principal mecanismo.

Lectura inicial

A lo largo de los años un importante número de científicos han intentado explicar la composición y el origen de la materia de la cual están constituidos todos los objetos que conocemos. En este devenir, se fueron desarrollando teorías más o menos cercanas a la “realidad”, soportadas con evidencia científica, y construidas sobre modelos previos y el conocimiento que éstos habían generado. Estos modelos intentan explicar lo que se creía que era la unidad de materia más pequeña, denominada átomo. La palabra átomo fue acuñada en Grecia, en el siglo V a.C por Demócrito, para denominar a estas partículas indivisibles que conforman la materia y entre las cuales, según su idea, sólo existía vacío (Garriga & Neolcyt, 2008). Ya en el siglo XIX el físico John Dalton (1766-1844) presentó el primer modelo atómico iniciando una carrera de descubrimientos en la que participaron, entre otros, J.J. Thomson (1824-1907), con su modelo de “budín de pasas” soportado por el descubrimiento de una partícula subatómica conocida como electrón; Ernest Rutherford (1871-1937), quien representó la estructura atómica según un modelo planetario; y el físico Niels Bohr (1885-1962) que propuso una teoría en la que los electrones describen un movimiento en “órbitas”, cada una con una energía definida. Esta última teoría fue apoyada en las investigaciones llevadas a cabo por el físico Max Planck (1858-1947), considerado el fundador de la teoría cuántica, quien determinó que la materia sólo puede intercambiar energía en cantidades discretas denominadas “cuantos”.

Según el modelo atómico actual, los átomos están compuestos por un núcleo que contiene partículas subatómicas denominadas protones y neutrones (conocidas colectivamente como nucleones) y que determina casi toda su masa. Alrededor del núcleo se encuentran los electrones que ocupan diferentes orbitales con sus respectivas energías. La Tabla 3.1 muestra las propiedades de las partículas subatómicas. La carga positiva del núcleo (provista por los protones) coincide exactamente con la carga negativa de los electrones.

Tabla 3.1. Propiedades de las partículas subatómicas

Partícula	Símbolo	Carga ^a	Masa (kg)
electrón	e ⁻	-1	9,109 x 10 ⁻³¹
protón	p	+1	1,673 x 10 ⁻²⁷
neutrón	n	0	1,675 x 10 ⁻²⁷

^a La carga del electrón y la del protón se expresan como múltiplos de 1,602 x 10⁻¹⁹ C en el SI

Los electrones pueden “saltar” de un nivel energético a otro al absorber o liberar exactamente la cantidad adecuada de energía. Este proceso se denomina una transición. Los electrones absorben energía para moverse a un nivel de energía más alto (más lejos del núcleo), y liberan energía al moverse a un nivel de energía menor (más cercano al núcleo). La energía liberada o absorbida en estas transiciones toma la forma de radiación electromagnética (por ejemplo, luz visible, radiación infrarroja o ultravioleta). La misma cantidad de energía se libera cada vez que ocurre una transición idéntica, no importa dónde o cuántas veces se mide.

Como con todas las ondas, la radiación tiene una cierta frecuencia (es decir, presenta un cierto número de ondas completas en un segundo, similar a la forma en que un péndulo completa un cierto número de oscilaciones en un minuto) y esta frecuencia puede medirse. Así, un reloj puede basarse en la frecuencia de onda de la energía de transición de un electrón en un átomo, de manera similar a un reloj basado en el balanceo de un péndulo (NIST, 2014).

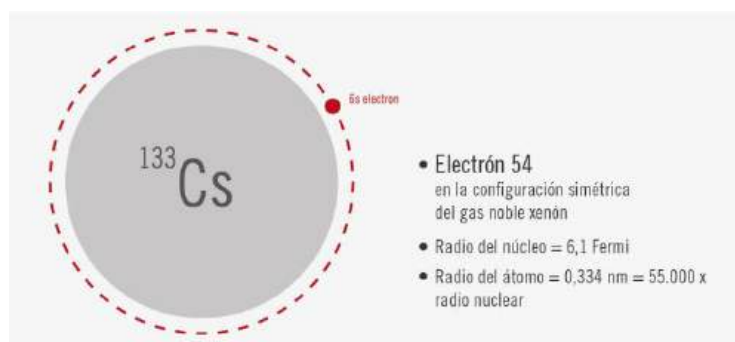


Figura 3.1. Ilustración descriptiva del átomo de cesio (Fermi = 1 x 10⁻¹⁵ m)

El átomo de cesio define el segundo “s” en el Sistema Internacional (SI). El segundo es 9.192.631.770 períodos de la radiación electromagnética emitida o absorbida por la transición del

estado fundamental del átomo de cesio. Esto significa que un segundo es la cantidad de tiempo que le toma a la radiación de esta transición para realizar 9.192.631.770 ondas completas.

Como con todos los átomos, no importa dónde o cómo se mide, este número nunca cambiará, lo que significa que es un método mucho más confiable de cronometraje que el movimiento del sol en el cielo.

Cantidades químicas

La autoridad reconocida universalmente como Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC, por sus siglas en inglés), es una organización encargada, entre otras tareas, de desarrollar recomendaciones que sean uniformes, consistentes y claras, respecto de la nomenclatura y terminología a utilizar en el campo científico, así como de presentar la información de los valores de unidades y/o convenciones físicas particulares. Esta organización, define a la unidad de masa atómica (*uma*) como la doceava parte de la masa de un átomo de ^{12}C , “carbono 12”. Entonces, la masa de un átomo de ^{12}C es exactamente 12 *uma*. Esta cantidad no pertenece al Sistema Internacional de Medidas (SI) y es utilizada para expresar masas de partículas de tamaño atómico. Una *uma* es igual a $1,66054 \times 10^{-24} \text{ g}$ ($1,66054 \times 10^{-27} \text{ kg}$) (McNaught y Wilkinson, 1997). Así, se puede expresar la masa de un protón como 1,0073 *uma* y la del neutrón como 1,0087 *uma*.

Es posible que te preguntes qué significa el símbolo ^{12}C , que acabamos de utilizar para definir la unidad de masa atómica. Para dar respuesta a esto, debemos avanzar en otros conceptos importantes relacionados con la estructura atómica; el **número atómico (Z)** y el **número másico (A)**. *El número atómico indica la cantidad de protones que tiene cada átomo de un elemento en su núcleo.* Este número debe coincidir con el número de electrones del átomo, que es neutro, para que la carga eléctrica neta sea igual a cero. *El número másico considera el número total de neutrones y protones que posee un átomo de un elemento y su nombre proviene de contemplar casi la totalidad de la masa de un átomo, contenida en el núcleo (de la tabla 3.1 se puede observar que la masa de los electrones es casi 2000 veces menor a la de los protones y neutrones).* Por lo tanto, la masa de los protones y de los neutrones de un elemento constituyen la masa atómica de un átomo de ese elemento.

El número de neutrones de un átomo de cualquier elemento puede calcularse haciendo la diferencia entre A y Z. La manera de simbolizar el número Z y A para un átomo de un elemento cualquiera X es la siguiente:



Existen especies atómicas de un mismo elemento que se diferencian entre sí a nivel subatómico por su número másico, es decir, poseen la misma cantidad de protones y electrones, pero diferente cantidad de neutrones en sus núcleos. Estas especies se denominan **isótopos**. Por ejemplo, los isótopos más comunes (es decir, los más abundantes en la tierra) del uranio son el

$^{235}_{92}\text{U}$ y el $^{238}_{92}\text{U}$. Si bien difieren en 3 neutrones por cada núcleo atómico, sólo el uranio con número másico igual a 235 posee las propiedades necesarias para ser aplicado en reactores nucleares. Algunos isótopos, como el $^{60}_{27}\text{Co}$, poseen propiedades que los hacen aptos para ser aplicados como combustibles en la industria nuclear, como agentes esterilizantes y para llevar adelante terapias contra el cáncer en el ámbito de la salud.

La masa atómica MA (también llamado peso atómico) de un elemento es un promedio ponderado de la masa atómica de todos los isótopos naturales de un elemento y su abundancia relativa. Este promedio se calcula como la sumatoria del producto de las masas atómicas (en uma) por la abundancia de cada uno de los isótopos. Por ejemplo, el cloro tiene 75,5% del isótopo $^{35}_{17}\text{Cl}$ y 24,5% del isótopo $^{37}_{17}\text{Cl}$. Por lo tanto, la masa de un átomo de cloro se calcula con la fórmula:

$$MA \text{ Cl} = 0,755 \times 35 \text{ uma} + 0,245 \times 37 \text{ uma} = 35,49 \text{ uma}$$

Más adelante en este capítulo, veremos que la Tabla Periódica informa la **masa atómica relativa** (MAR) de los elementos. La masa atómica relativa MAR (también llamado peso atómico relativo, PAR) es un número que indica cuántas veces más pesado es el átomo de un elemento respecto de la uma. Así, las masas de todos los átomos de los diferentes elementos quedan expresadas en relación con la uma.

$$\frac{\text{masa de 1 átomo de hidrógeno}}{\text{masa de 1 uma}} = 1,00797$$

$$\frac{\text{masa de 1 átomo de oxígeno}}{\text{masa de 1 uma}} = 15,9994$$

Por lo tanto, debido a que la MAR es relativo a la unidad de masa atómica no tiene unidades.

Ejercicio propuesto 3.1. Completá el siguiente cuadro.

Símbolo	Número de protones	Número de electrones	Número de neutrones	Número atómico	Número másico
$^{23}_{11}\text{Na}$					
C	6		6		
Cl				17	35

La **masa molecular relativa** MMR (habitualmente llamado peso molecular relativo, PMR) de un compuesto es la masa que se obtiene al sumar las masas atómicas relativas MAR de cada uno de los elementos que lo componen multiplicado por la cantidad de los átomos presentes en su fórmula molecular.

Según se discutió en el capítulo 2, el número de Avogadro establece que hay $6,022 \times 10^{23}$ átomos en 1 mol de un elemento. Entonces, a partir de ese número y la MAR es posible calcular la masa de 1 mol de átomos, denominada masa molar atómica o átomo-gramo. Veamos este cálculo para el átomo de oxígeno:

$$\frac{15,999 \text{ uma}}{1 \text{ átomo}} 6,022 \times 10^{23} \text{ átomos} = 9,635 \times 10^{24} \text{ uma}$$

$$9,635 \times 10^{24} \text{ uma} \frac{1,66054 \times 10^{-24} \text{ g}}{1 \text{ uma}} = 15,999 \text{ g}$$

La masa molar de 1 mol de los átomos de un elemento, coincide numéricamente con su MAR, solo que está expresada en gramos. Del mismo modo, la masa molar de un compuesto molecular es la masa de 1 mol de sus moléculas, lo que habitualmente se denomina molécula-gramo (ver ejercicio tipo 3.1.).

Ejercicio tipo 3.1. Calcúlala MMR y la masa molar del HNO_3 si la MAR del oxígeno es 16, MAR(H) es 1 y MAR(N) es 14. ¿Cuál es la masa de una molécula de ese compuesto en uma y gramos?

Resolución

La MMR del ácido nítrico es la sumatoria de la MAR del hidrógeno, más la MAR del nitrógeno, más tres veces la MAR del oxígeno.

$$MMR (\text{HNO}_3) = 1 + 14 + 3 \times 16 = 63$$

La masa molar es 63 g. La masa de 1 molécula del compuesto en unidades de masa atómica es 63 uma. Para calcular la masa de una molécula en gramos debemos recurrir a la equivalencia entre uma y gramos,

$$63 \text{ uma} \frac{1,66054 \times 10^{-24} \text{ g}}{1 \text{ uma}} = 1,046 \times 10^{-22} \text{ g}$$

Alternativamente este cálculo puede realizarse considerando el número de Avogadro y la masa molar de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$\frac{63 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \frac{1 \text{ mol}}{6,022 \times 10^{23} \text{ moléculas}} = 1,046 \times 10^{-22} \text{ g}$$

El modelo de Niels Bohr para el átomo de hidrógeno

Niels Bohr propuso una teoría planetaria del átomo según la cual los electrones de un mismo átomo pueden ocupar órbitas distintas con valores de energía fijos diferentes y separadas de otras órbitas por “cuantos” o unidades fijas de energía. Se comprobó que esta teoría sólo describe y permite hacer predicciones sobre el comportamiento del átomo de hidrógeno y de átomos hidrogenoides (especies que poseen solo un electrón al igual que el átomo de hidrógeno). Los postulados de este modelo atómico son los siguientes:

- 1- *En un átomo, el electrón tiene ciertos estados de movimiento definidos y estacionarios, cada uno de estos estados tiene una energía fija y definida.*
- 2- *El electrón en un átomo gira alrededor del núcleo en órbitas circulares cuyos radios responden a la ecuación:*

$$r = \frac{n^2 a_0}{Z}$$

Donde n representa el número de la órbita, llamado número cuántico principal, a_0 es el radio de la primera órbita y Z es el número atómico.

- 3- *El electrón en un átomo gira alrededor del núcleo en órbitas circulares que tienen energía fija y definida:*

$$E = -\frac{R_H Z^2}{n^2}$$

Donde R_H representa la constante de Rydberg, cuyo valor es igual a $2,8 \times 10^{-18}$ joules.

- 4- *Cuando un electrón está en una órbita no irradia luz, pero si cambia de estado se emite o absorbe radiación cuya energía corresponde a la diferencia de energía entre los dos estados. Esta diferencia de energía puede calcularse según la siguiente ecuación:*

$$\Delta E = R_H Z^2 \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

Donde ΔE representa la diferencia de energía entre los estados electrónicos considerados, n_i y n_f son el número de la órbita desde y hacia dónde se produce el cambio de la posición del electrón, respectivamente, y representan el estado inicial y final del sistema.

Modelo atómico actual y orbitales atómicos

En esta sección abordaremos el estudio de la configuración electrónica del átomo como una forma de establecer relaciones entre elementos con comportamientos químicos similares. Estas similitudes dieron origen a la organización periódica de los elementos, que se estudiará en la sección siguiente.

El modelo atómico actualmente aceptado establece que la trayectoria y la posición exactas de un electrón en un momento determinado no pueden conocerse con precisión al mismo tiempo (*principio de incertidumbre de Heisenberg*); sin embargo, es posible conocer la probabilidad de que un electrón se encuentre en una cierta región alrededor del núcleo en un instante dado. Las regiones de alta probabilidad de encontrar electrones o de elevada *densidad electrónica* se denominan *orbitales*, y son muy diferentes de las órbitas descritas en el modelo de Bohr. El modelo moderno surge de reconocer la naturaleza ondulatoria del electrón y su comportamiento se describe en términos de ondas, a través de la denominada ecuación de onda o de Schrödinger, en honor a quien la propuso, Erwin Schrödinger (1887-1961).

Cada orbital tiene una *energía* y una *forma características*, y se describe a través de sus números cuánticos: n , l , y m_l , que surgen de la resolución de la ecuación de onda. Existe un cuarto número cuántico, m_s , que completa la identificación unívoca de los electrones ubicados en los orbitales.

El *número cuántico principal*, n , toma valores enteros positivos (1, 2, 3...). Al aumentar n , el orbital se hace más grande y el electrón pasa más tiempo lejos del núcleo. Esto implica que el electrón tiene mayor energía y se encuentra menos atraído por el núcleo (su energía cinética se opone a la atracción nuclear).

El *número cuántico azimutal*, l , toma valores enteros entre 0 y $n - 1$ para cada valor de n . Este número cuántico define la forma del orbital y se designa con una letra: s , p , d , f (ver figuras 3.2, 3.3 y 3.4). Las figuras muestran la manera más simple de representar un orbital atómico, esto es, como una superficie límite que encierra las regiones más densas de la nube electrónica, dentro de la cual existe 90% de probabilidad de encontrar al electrón.

Todos los orbitales con un mismo n constituyen una *capa electrónica*. Los orbitales que comparten un mismo n y l constituyen un *subnivel* o *subcapa electrónica* (subcapa $1s$, $2p$, $4d$, etc.). La tabla 3.2 detalla los orbitales que forman una subcapa.

Tabla 3.2. Orbitales y subcapas electrónicas

Valor de l	Nombre del orbital	Geometría	N° de orbitales en la subcapa
0	s	Densidad electrónica esférica alrededor del núcleo A mayor n , mayor radio de orbital s	1
1	p	La densidad electrónica se desarrolla en dos lóbulos opuestos alrededor del núcleo (forma de mancuerna) A mayor n , mayor tamaño del orbital	3
2	d	Geometrías complejas	5
3	f	Geometrías complejas	7

La última columna de la tabla 3.2 indica la cantidad de orbitales que pueden existir en cada subcapa. Una subcapa $1s$, $2s$ o $3s$ sólo contiene un orbital; mientras que una subcapa $2p$, $3p$ o $5p$ contiene hasta 3 orbitales. Esta cantidad se determina para cada tipo de orbital a través del *número cuántico magnético*, m_l , que puede tomar valores enteros entre l y $-l$, incluyendo el cero. Este número cuántico describe la orientación del orbital en el espacio. Por ejemplo, los tres orbitales de una *subcapa p* se designan típicamente como p_x , p_y y p_z , para indicar su orientación en el plano cartesiano; se trata de tres orbitales con idéntica forma, tamaño y energía que difieren en su orientación espacial (ver figura 3.3).

Los orbitales se llenan con un máximo de dos electrones por orbital. Para describir cada uno de esos electrones de forma unívoca se introduce el *número cuántico magnético de espín*, m_s , que puede adoptar únicamente los valores $+\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$. Este número cuántico, se puede visualizar de una manera simplificada como el sentido de giro de los electrones, bajo la hipótesis de que estas partículas subatómicas se comportan como pequeñas esferas que giran sobre su propio eje. Una carga en rotación produce un campo magnético. Los dos sentidos de espín opuestos producirían campos magnéticos con orientación opuesta. Sin embargo, cabe aclarar que el espín es un fenómeno puramente cuántico que no tiene analogía en mecánica clásica.

La tabla 3.3 muestra los valores de los números cuánticos, los orbitales y la máxima cantidad de electrones que pueden alojar para los tres primeros niveles cuánticos.

Tabla 3.3. Números cuánticos, orbitales y cantidad máxima de electrones

Números cuánticos				Orbitales	Cantidad electrones
n	l	m _l	m _s		
1	0	0	± ½	1s	2
2	0	0	± ½	2s	2
	1	-1,0,1	± ½	2p _x , 2p _y , 2p _z	6
3	0	0	± ½	3s	2
	1	-1,0,1	± ½	3p _x , 3p _y , 3p _z	6
	2	-2,1,0,1,2	± ½	3d _{xy} , 3d _{yz} , 3d _{xz} , 3d _{x²-y²} , 3d _{z²}	10



Figura. 3.2. Los orbitales atómicos s de los niveles 1, 2 y 3 comparten una misma geometría, pero difieren en su tamaño y, en consecuencia, en su energía asociada.

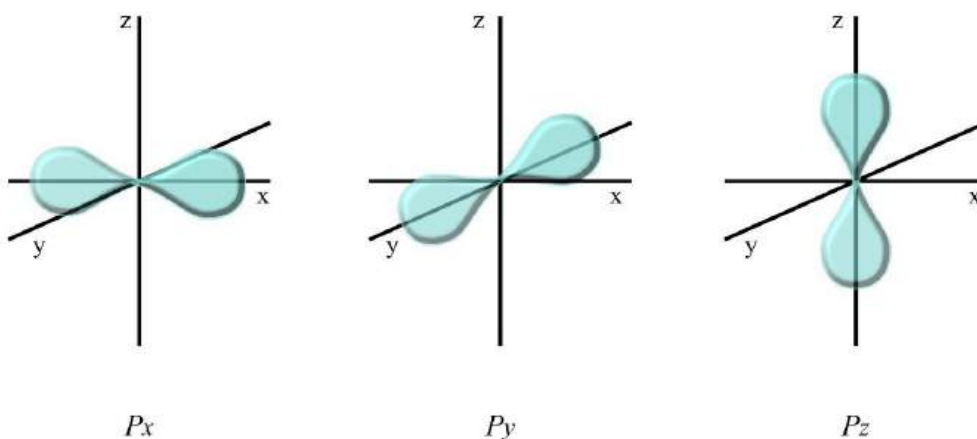


Figura 3.3. Orbitales atómicos p_x, p_y y p_z de un subnivel. Su geometría, tamaño y energía son idénticos; únicamente difieren en su orientación en el espacio.

En un átomo polielectrónico, para un valor dado de **n**, la energía de un orbital aumenta al incrementarse el valor de **l**: $s < p < d < f$. Por otro lado, todos los orbitales de una subcapa tienen la misma energía y por esto se denominan orbitales degenerados.

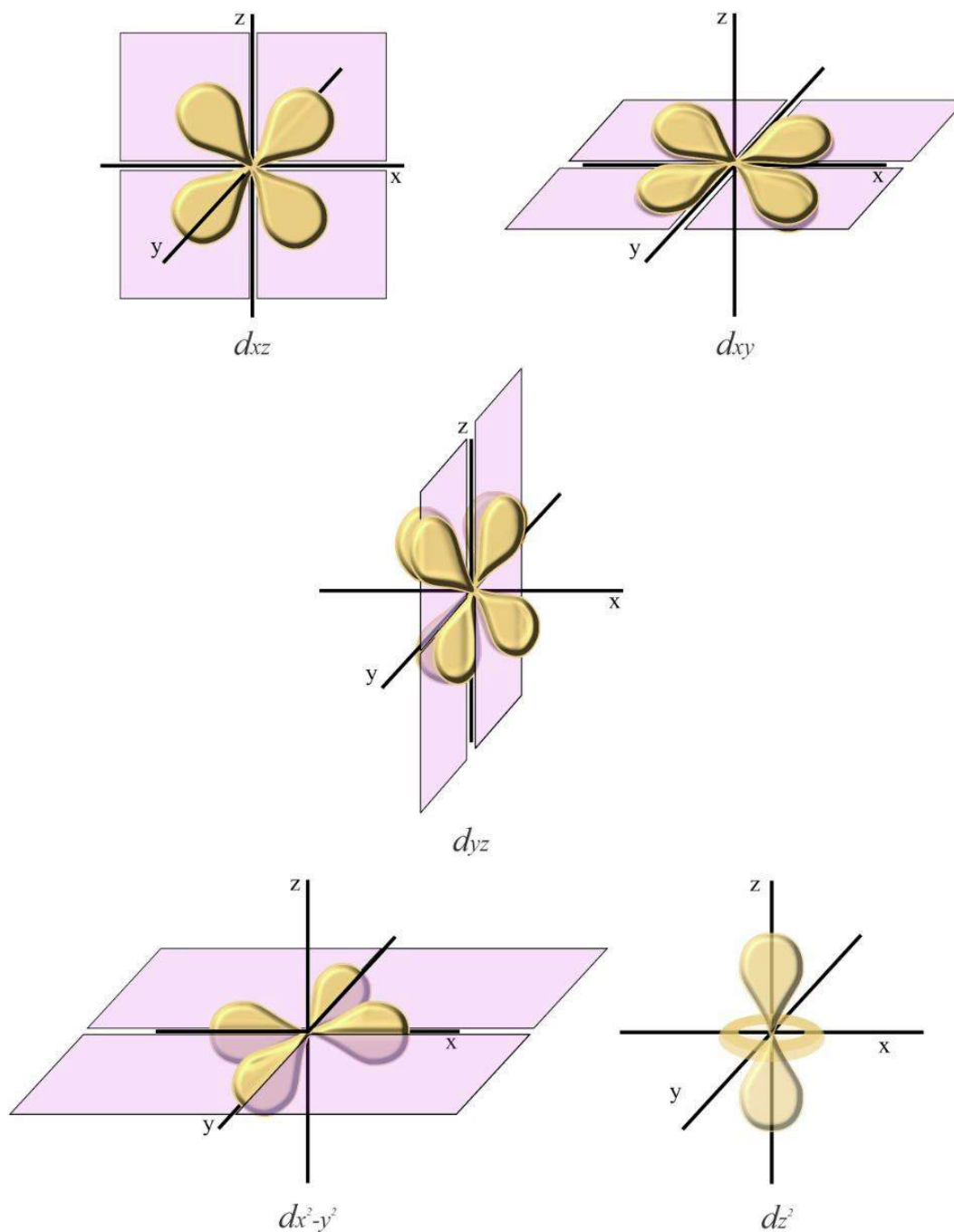


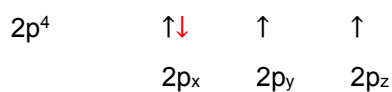
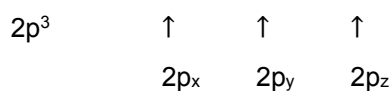
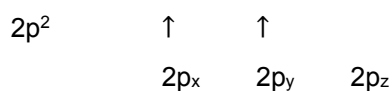
Figura 3.4. Los cinco orbitales atómicos d pertenecientes a un subnivel presentan geometrías complejas y diferentes entre sí, pero los electrones que ocupan estos orbitales poseen la misma energía.

Configuración electrónica

La energía de los orbitales determina cómo se ubicarán los electrones dentro del átomo, ya que estos ocupan primero las capas y subcapas de menor energía (más atraídas por el núcleo) y a medida que estas se llenan, comienzan a ocupar los orbitales de mayor energía (más alejados del núcleo). La forma en que los electrones se distribuyen entre los diferentes orbitales de un átomo es su **configuración electrónica**.

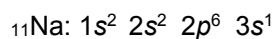
El máximo número de electrones que ocupan un orbital viene dado por un principio que gobierna la disposición de los electrones en átomos polielectrónicos conocido como el *principio de exclusión de Pauli*. Este principio establece que en un átomo *no puede haber dos electrones que tengan el mismo conjunto de cuatro números cuánticos, n , l , m_l y m_s* . Para un determinado orbital, los valores de n , l y m_l están definidos; por lo tanto, para satisfacer el principio de exclusión, la única posibilidad es asignar distintos valores de espín a los electrones allí ubicados. Como m_s puede tomar sólo dos valores, el máximo número de electrones por orbital resulta ser 2.

La *regla de Hund* establece que cuando se llenan orbitales energéticamente equivalentes (degenerados) los electrones se ubican ocupando el máximo número de orbitales que estén vacíos y con el mismo valor de sus números cuánticos de espín. Esto es razonable, si consideramos que estas partículas subatómicas tienen la misma carga eléctrica; entonces podemos intuir que, para minimizar las repulsiones electrostáticas, será conveniente que se separen, ubicándose en orbitales de la misma energía que estén vacíos, antes que ubicarse en orbitales semillenos. Podemos ejemplificar esta regla llenando una subcapa 2p con 2, 3 y 4 electrones (representados con una flecha):

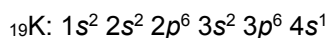


Notar que en el superíndice del orbital se indica la cantidad de electrones ubicados en cada subcapa. Las flechas rojas opuestas indican los sentidos opuestos de espín de cada electrón en el orbital. Observando el esquema, podemos confirmar que, como resultado de esta regla y para que cada sistema alcance su configuración electrónica energéticamente más estable, un átomo cualquiera tendrá la mayor cantidad de electrones no apareados (en orbitales semillenos) posible.

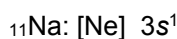
Estamos ahora en condiciones de establecer la configuración electrónica de los elementos. Comencemos por el sodio, Na, cuyo $Z = 11$. Esto implica que un átomo de sodio tendrá 11 protones en su núcleo y 11 electrones dispuestos en orbitales. De acuerdo con las reglas que estudiamos, la configuración del Na será:



Las subcapas *s* se llenan con un máximo de 2 electrones; las subcapas *p*, con 6 electrones; las subcapas *d*, con 10 electrones, de acuerdo con los números cuánticos m_l y m_s correspondientes a cada orbital según se observa en la Tabla 3.3. Ensayemos ahora las configuraciones electrónicas de otros metales alcalinos, litio y potasio:



Las configuraciones electrónicas pueden escribirse de forma abreviada, considerando la configuración del gas noble inmediatamente anterior en la tabla periódica y desarrollando la configuración de los electrones que se agregan a partir de ese punto, conocida como configuración electrónica externa (CEE) del elemento. Los electrones de la capa externa se denominan **electrones de valencia** y, como veremos en el capítulo 5 son los responsables de las uniones entre los átomos que conducen a la formación de moléculas. Algunos ejemplos de configuración electrónica abreviada son:



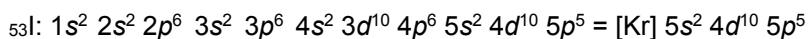
Al comparar estos metales, se observa una coincidencia entre sus CEE: la última subcapa está ocupada por 1 electrón y pertenece a un orbital *s*. Esta característica determina comportamientos químicos similares entre los elementos del *Grupo IA o 1 de la tabla periódica* (xs^1) (ver figura 3.6). Notar que la cantidad de electrones de valencia (1 en estos casos) coincide con la denominación del grupo de la tabla periódica al que pertenecen los elementos (IA). Además, el último nivel electrónico principal ocupado indica el período de la tabla periódica al cual pertenece el elemento: Li al segundo período, Na al tercer período y K al cuarto período. Estas observaciones se repiten a lo largo y ancho de la tabla periódica, como estudiaremos en la próxima sección.

Para completar las configuraciones electrónicas de elementos con mayor cantidad de electrones, es conveniente guiarnos con el siguiente esquema:



Figura 3.5. Esquema de llenado de los orbitales con electrones en la configuración electrónica.

Así, la configuración electrónica del halógeno iodo será:



Al sumar los electrones ubicados en la última capa, subcapas 5s y 5p, se infiere que el iodo pertenece al Grupo VII A (o 17) y al quinto período. Te invitamos a comprobarlo en la Tabla periódica que se presenta en la próxima sección (ver Figura 3.6).

Ejercicio propuesto 3.2. Escribí las configuraciones electrónicas completas de las especies ${}^{35}_{17}\text{Cl}$, ${}^{12}_6\text{C}$, ${}^{14}_6\text{C}$, ${}^{25}_{12}\text{Mg}^{+2}$ (catión magnesio), ${}^{32}_{16}\text{S}$, ${}^{19}_9\text{F}^{-}$ (anión fluoruro).

Tabla y propiedades periódicas de los elementos

Hacia comienzos del siglo XIX, eran conocidos alrededor de cincuenta y cinco elementos químicos diferentes. Estos elementos poseen propiedades que varían extensamente y, en principio, no parecía existir relación alguna entre ellos. Este hecho generó la necesidad y la inquietud entre los científicos de la época de encontrar propiedades comunes a los diferentes elementos, para poder asociar y generalizar los comportamientos que se evidenciaban experimentalmente. Ya en 1829, el químico Johan Wolfgang, de nacionalidad alemana, observó que un elemento como el bromo, descubierto tres años antes por otro científico, poseía ciertas propiedades (color, reactividad y masa atómica) que lo situaban en un orden lógico entre el cloro y el iodo.

Si bien a través de los años fueron propuestos otros ordenamientos de los elementos, como el de “La ley de las octavas” mencionado por John Alexander Reina Newlands (1837-1898), que contemplaba la clasificación de los elementos según su masa atómica creciente, o el propuesto por el químico alemán Julius Lothar Meyer (1830-1895), que consideraba el volumen atómico de los átomos, ninguna de estas formas de establecer relaciones y ordenar los elementos prosperó, debido a que tenían ciertas falencias. En el año 1869, el químico ruso Dimitri Ivanovich Mendeleiev (1834-1907) publicó su versión de la tabla periódica de los elementos. Esta tabla se fue completando gracias al aporte de otros científicos que trabajaban en el área y al desarrollo de tecnologías de observación y análisis, como el espectroscopio (Asimov y col., 2008).

La tabla periódica actual (Figura 3.6.) es una herramienta importante utilizada en muchas áreas científicas para organizar y recordar datos químicos. Permite establecer relaciones entre elementos y extrapolar propiedades; en dicha tabla, los elementos están ordenados según su número atómico (Z) creciente, es decir, cada elemento tiene un electrón y un protón más que el elemento que lo precede. Dentro de la tabla periódica existe un ordenamiento de los elementos en tres categorías mayores: metales, no metales, y metaloides. Los metales, al contrario de los no metales, se caracterizan por ser buenos conductores del calor y la electricidad. Los elementos denominados “metaloides” tienen propiedades intermedias entre los no metales y los metales.

Las columnas de la tabla periódica son conocidas como *grupos*; estos van desde el 1 al 18 (según la convención de la IUPAC) y los elementos que están contenidos en un mismo grupo suelen tener propiedades físicas y químicas similares. Una denominación más antigua, aunque todavía vigente, para los grupos de la tabla periódica es de I a VIII A, para los denominados elementos representativos, y de I a VIII B, para los elementos de transición (figura 3.6). Algunos elementos pertenecientes a un mismo grupo poseen una denominación particular. Este es el caso de los *metales alcalinos*, elementos comprendidos en el grupo 1 (IA); los *metales alcalinotérreos*, elementos del grupo 2 (IIA); los elementos del grupo 17 (VIIA) se conocen como *halógenos* y los elementos del grupo 18 (VIIIA) como *gases nobles*. Los elementos contenidos en los grupos que van desde el tres al once y los periodos desde el cuatro al siete se denominan *metales de transición*.

Las filas de la tabla periódica se denominan *periodos* (van desde el primero al séptimo) y el periodo al que pertenece cada elemento coincide con el nivel electrónico más externo ocupado en su estado fundamental. A medida que se avanza por un mismo periodo, la configuración electrónica de los elementos cambia agregando un electrón.

La imagen muestra la tabla periódica actual con una leyenda que clasifica los elementos en tres categorías: Metales (verde), Metaloides (púrpura) y No metales (azul). La tabla está organizada en 7 periodos (filas) y 18 grupos (columnas). Cada elemento incluye su símbolo químico, número atómico y nombre. Se destacan algunos grupos con nombres tradicionales: Grupo I (IA) Metales Alcalinos, Grupo 2 (IIA) Metales Alcalinotérreos, Grupo 17 (VIIA) Halógenos, Grupo 18 (VIIIA) Gases Nobles, Grupo 13 (IIIA) Boro, Grupo 14 (IVA) Carbono, Grupo 15 (VA) Nitrógeno, Grupo 16 (VIA) Oxígeno, Grupo 17 (VIIA) Halógenos, Grupo 18 (VIIIA) Gases Nobles. También se muestran los Lantánidos y Actínidos en bloques separados.

Figura 3.6. Tabla periódica actual. Las filas representan los periodos y las columnas los grupos.

Propiedades periódicas

Como se mencionó, la tabla periódica permite identificar en los diferentes elementos propiedades comunes que varían a lo largo de los periodos y los grupos. Estas propiedades se denominan **propiedades periódicas** y son:

- La carga nuclear efectiva
- El radio atómico
- El radio iónico
- La energía de ionización

- La afinidad electrónica
- La electronegatividad

La *carga nuclear efectiva* se simboliza habitualmente como Z_{ef} y representa la atracción neta que experimenta un electrón, que se encuentra en un nivel energético de un átomo en particular, debido a la carga positiva concentrada en el núcleo del mismo átomo. Esta atracción contempla tanto la interacción del electrón con el núcleo como un efecto de repulsión promedio que ejercen sobre él el resto de los electrones que conforman el átomo. La carga nuclear efectiva Z_{ef} que actúa sobre un electrón exterior de un átomo es la diferencia entre el número de protones del núcleo (número atómico Z) y una constante, a , denominada constante de apantallamiento: $Z_{ef} = Z - a$. La constante de apantallamiento considera la densidad electrónica que se encuentra entre el núcleo y el electrón que se está analizando, que apantalla o “escuda” a éste de la carga nuclear. Los electrones internos producen un mayor apantallamiento que los electrones más externos.

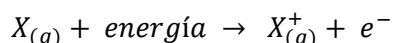
La Z_{ef} aumenta de izquierda a derecha a lo largo de un período, como resultado del incremento del número de protones en el núcleo. Si bien el número de electrones aumenta en el mismo sentido a lo largo de un período, los electrones se agregan en las capas incompletas más externas, contribuyendo escasamente al apantallamiento de la carga nuclear ya provocada por los electrones internos. Así, a lo largo de un período, aumenta Z y a varía sólo ligeramente por lo que se observa un aumento en Z_{ef} . Al descender en un grupo, la carga nuclear efectiva sólo aumenta levemente, ya que, si bien Z aumenta, a también lo hace debido a que se incorporan nuevas capas de electrones internos, de manera que su diferencia (Z_{ef}) no presenta grandes cambios.

El *radio atómico* se define como la mitad de la distancia entre los núcleos de dos átomos cuando estos están unidos químicamente. Esta distancia, muchas veces también denominada “radio atómico de enlace” o “radio atómico covalente”, es levemente más corta que el radio atómico de un átomo aislado o de “no enlace”, también denominado radio de Van der Waals. Esta definición de radio atómico considera que los bordes o “límites” de los átomos generalmente son difusos y las nubes electrónicas pueden interpenetrarse. Es esperable que cuantas más capas electrónicas tenga un átomo, la probabilidad de hallar electrones más lejos del núcleo sea mayor. Por esta razón, cuando descendemos en un grupo de la tabla periódica (aumentamos la cantidad de capas electrónicas disponibles), los radios atómicos de los elementos también aumentan. Al movernos de izquierda a derecha en un período de la tabla, el radio atómico disminuye. Este efecto es producido por el aumento de la carga nuclear efectiva, que en consecuencia incrementa la atracción de los electrones hacia el núcleo. Si bien existe un aumento del número de electrones a lo largo de un período, como se explicó anteriormente, éstos se posicionan en capas externas parcialmente completas, con lo cual no habilitan nuevos orbitales y al ser externos no contribuyen considerablemente al apantallamiento de la carga nuclear.

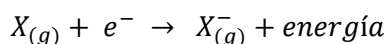
La generación de un catión involucra la pérdida de uno o más electrones de los orbitales más externos de un átomo metálico. Debido a que la formación de un catión desocupa los orbitales

más extendidos y también reduce las repulsiones electrón-electrón su radio se reduce respecto del radio atómico. En coherencia con este análisis, los aniones, que son átomos no metálicos que han ganado uno o más electrones y por lo tanto poseen carga negativa, tienen un radio iónico generalmente mayor que el radio atómico correspondiente, debido a la repulsión electrónica adicional generada por la inclusión de nuevos electrones en los orbitales.

La pérdida de uno o más electrones de un átomo no se produce de manera espontánea, sino que requiere de cierta energía, debido a que, en el átomo, los electrones se encuentran sometidos a un campo eléctrico que los mantiene “ligados” de alguna manera al núcleo. Para extraer un electrón del núcleo, es necesario aplicar cierta cantidad de energía que supere la atracción nuclear. La mínima energía necesaria para remover un electrón de un átomo aislado en estado gaseoso y generar un catión gaseoso se denomina *energía de ionización* y es una medida indirecta de qué tan fuertemente se encuentra unido el electrón al átomo. Por lo general, cuanto menos atraído esté el electrón por el núcleo, será necesaria menos energía para removerlo del átomo. Los átomos más grandes tienen energías de ionización más pequeñas, dado que sus electrones de capas más externas se encuentran menos atraídos, y por tanto esta propiedad periódica disminuye al descender en un grupo. Cuando se recorre un periodo de la tabla periódica de izquierda a derecha, la energía de ionización aumenta debido al incremento de la carga nuclear efectiva, que conduce a una mayor atracción de los electrones por el núcleo. La energía de ionización puede ser representada como la energía puesta en juego en la siguiente ecuación, donde X es un átomo de un elemento en estado gaseoso y X⁺ el catión formado al extraerle un electrón:



Así como fue definida la energía de ionización, también es posible mencionar la variación de energía asociada a la adición de un electrón a un átomo gaseoso para formar un anión en el mismo estado. Esta variación de energía es representada por la *afinidad electrónica* y refleja la tendencia de los átomos a ganar electrones para formar un anión. Los elementos que poseen elevada afinidad electrónica liberarán energía en el proceso. De forma esquemática se puede representar la afinidad electrónica como el proceso donde un átomo X de un elemento en estado gaseoso genera un anión X⁻ por ganancia de un electrón:



Dado que los aniones de muchos elementos son químicamente inestables, la afinidad electrónica es difícil de medir experimentalmente. Sin embargo, existen tendencias a lo largo de la tabla periódica que permiten relacionar a los elementos. Por ejemplo, los halógenos liberan energía cuando adquieren electrones, debido a su afinidad por estos para producir haluros. Los gases nobles tienen baja tendencia a ganar electrones, lo cual está de acuerdo con su baja reactividad.

Mientras que la afinidad electrónica no varía considerablemente en un grupo, este parámetro aumenta considerablemente de izquierda a derecha en un periodo: desde valores muy pequeños, para metales alcalinos y alcalinotérreos, hasta alcanzar magnitudes importantes (muy negativas, gran afinidad) para los halógenos, que al captar un electrón adquieren la configuración electrónica del gas noble más cercano (configuración muy estable).

La *electronegatividad* se define como la capacidad que tiene un átomo para atraer los electrones hacia sí, cuando está formando un enlace con otro átomo. Dado que la definición no considera la electronegatividad de un átomo aislado, es un concepto relativo que sólo puede evaluarse respecto de otros elementos. Así, elementos con mayor electronegatividad tendrán mayor tendencia a atraer los electrones cuando forman un enlace. Esta propiedad está íntimamente relacionada con la afinidad electrónica y con la energía de ionización, ya que aquellos elementos que tienen gran afinidad electrónica y alta energía de ionización presentarán valores de electronegatividad elevados. Si bien pareciera que los conceptos de electronegatividad y afinidad electrónica son equivalentes, ya que ambos indican la tendencia de un átomo a atraer electrones, uno se refiere a la tendencia de un átomo aislado para captar un electrón adicional y puede ser medida experimentalmente (afinidad electrónica), mientras que el otro (la electronegatividad) es una medida relativa de la capacidad de un átomo de atraer los electrones cuando forma parte de un enlace. Al igual que la energía de ionización y la afinidad electrónica, la electronegatividad aumenta de izquierda a derecha en un periodo y disminuye al descender en un grupo. Sin embargo, los metales de transición presentan algunas irregularidades a estas tendencias.

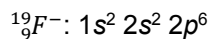
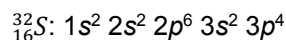
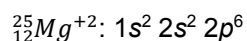
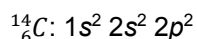
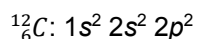
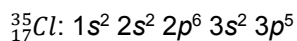
Ejercicio propuesto 3.4. Ordená en forma creciente (de menor a mayor) las energías de ionización de las siguientes especies: i) Ba, H, Ge; iii) Co^{2+} , Co, Co^+ ; iii) S, S^{2-}

Ejercicio propuesto 3.3. Ordená en forma creciente (de menor a mayor) los radios las siguientes especies: i) O, Si, Be, F; iii) Fe^{3+} , Fe, Fe^{2+} ; iii) Li, K, P, Pb; iv) Cl, Cl^-

Respuestas de los ejercicios propuestos

Ejercicio propuesto 3.1.

Símbolo	Número de protones	Número de electrones	Número de neutrones	Número atómico	Número másico
${}^{23}_{11}\text{Na}$	11	11	12	11	23
C	6	6	6	6	12
Cl	17	17	18	17	35

Ejercicio propuesto 3.2.**Ejercicio propuesto 3.3.**

- i) $\text{F} < \text{O} < \text{Be} < \text{Si}$
- ii) $\text{Fe}^{+3} < \text{Fe}^{+2} < \text{Fe}$
- iii) $\text{Li} < \text{P} < \text{K} < \text{Pb}$
- iv) $\text{Cl} < \text{Cl}^{-}$

Ejercicio propuesto 3.4.

- i) $\text{Ba} < \text{Ge} < \text{H}$
- ii) $\text{Co} < \text{Co}^{+} < \text{Co}^{+2}$
- iii) $\text{S}^{2-} < \text{S}$

Referencias

- Asimov, I., Cruz, A., Villena, M. I. (2008). *Breve historia de la química: Introducción a las ideas y conceptos de la química*. Alianza.
- Garriga, C., Neolcyt, G. (2008). Notas sobre la historia de la voz del átomo. *Revista de investigación lingüística*, 11(1), p. 30.
- McNaught, A. D., & Wilkinson, A. (1997). *International Union of Pure and Applied Chemistry* (Vol. 1669). Oxford: Blackwell Science. <http://www.old.iupac.org/publications/books/author/mcnaught.html>
- NIST launches a new U.S. time standard: NIST-F2 atomic clock (2014). Recuperado de <https://www.nist.gov/news-events/news/2014/04/nist-launches-new-us-time-standard-nist-f2-atomic-clock>

CAPÍTULO 4

Los compuestos: fórmulas y nomenclatura

Laura E. Briand

En este capítulo reflexionaremos sobre la importancia de un lenguaje químico universal, presentaremos un método para formular sustancias químicas y las reglas de nomenclatura para nombrar compuestos inorgánicos.

Lectura inicial

Lxs primerxs químicxs, conocidxs como “alquimistas”, estaban principalmente interesadxs en la producción de nuevas sustancias o en la elaboración de nuevos procedimientos para la preparación de materiales preciosos a bajo costo. Por esta razón, un laboratorio alquímico clásico en Europa contenía uno o más hornos y entre las herramientas comunes de los alquimistas había fuelles y alicates (Fabbrizzi, 2008). Su objetivo principal no era desarrollar teorías para explicar los resultados de los experimentos.



Figura 4.1. Alquimista en el horno (1312–1313), fresco realizado por Giotto encontrado en el Palazzo della Ragione en la ciudad de Padua en Italia.

De hecho, el estudio cuantitativo de la materia era distante ya que lxs alquimistas aceptaban la idea de que la materia estaba compuesta por agua, tierra, fuego y aire. Lxs alquimistas simplemente describían sus experimentos y para ello utilizaban símbolos como los que se muestran en la figura 4.2.



Figura 4.2. Símbolos utilizados por los alquimistas.

Se cree que los alquimistas utilizaban símbolos en vez de palabras porque la escritura resultaba más rápida y para resguardar las técnicas obtenidas en el laboratorio. En muchos casos no hay una relación directa entre el ícono y las propiedades de las sustancias que representan (con excepción del aceite que está representado con tres gotas).

La evolución de la alquimia a la química

La utilización de la balanza de precisión en el laboratorio de los alquimistas en el siglo XVIII permitió establecer la masa de reactivos y productos, con lo cual la disciplina se convirtió en cuantitativa. Así fue como Antoine Lavoisier (1743-1794) formuló la ley de la conservación de la masa, y más tarde John Dalton (1766-1844) enunció su teoría atómica.

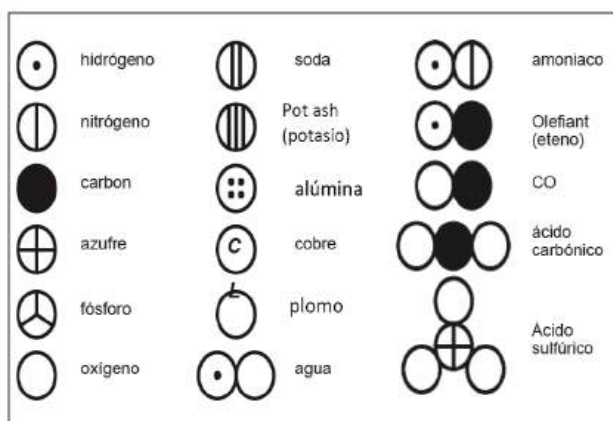


Figura 4.3. Algunos símbolos químicos y fórmulas presentados por John Dalton (1808).

Según Dalton, existía un número definido de elementos (36 elementos) formados por pequeñas partículas llamadas átomos. Además, los átomos de un elemento se combinan con los átomos de otro elemento para formar compuestos. Dalton representó simbólicamente a los elementos continuando con el estilo de los alquimistas (ver figura 4.3). Asimismo, describió los compuestos con fórmulas obtenidas con la combinación de los símbolos. En 1813, Jöns Jakob Berzelius inventó la notación química moderna en la cual (i) cada elemento se indica con la primera

letra mayúscula de su nombre en latín y (ii) si dos elementos poseen la misma letra inicial, entonces se utiliza también la segunda letra del nombre en latín en minúscula. Por lo tanto, lo que todavía llamamos símbolos de los elementos ya no son símbolos, sino abreviaturas.

IUPAC: la nomenclatura moderna



Según se comentó en el capítulo anterior, la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC) fue creada en 1919 por químicos de la industria y del ámbito académico con el fin de estandarizar las reglas de formulación y nomenclatura de compuestos químicos inorgánicos y orgánicos, las masas atómicas, constantes físicas, el formato de las publicaciones y la edición de tablas con las propiedades de la materia. El objetivo principal de la nomenclatura química es proporcionar una metodología para asignar descriptores (nombres y fórmulas) de especies químicas para que puedan identificarse sin ambigüedad, lo que facilita la comunicación. En este sentido, la IUPAC publicó en 2005 un documento llamado *Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC recommendations 2005* con una serie de reglas para formular y nombrar compuestos inorgánicos. Estas reglas constituyen el eje temático de estudio de este capítulo.

Formulación de compuestos

En este apartado presentaremos las reglas que provee la IUPAC para la escritura de las fórmulas de los compuestos inorgánicos. La *fórmula empírica* provee la composición más simple del compuesto y se presenta como la combinación de símbolos de elementos químicos con sus correspondientes subíndices numéricos (Connelly, 2005). En este caso, los elementos se ordenan alfabéticamente con excepción de aquellos compuestos que contienen carbono e hidrógeno, en cuyo caso se nombra primero el carbono C y luego el hidrógeno H. A diferencia de la anterior, la *fórmula molecular* indica la composición real de un compuesto. En este caso, los elementos menos electronegativos se listan primero en la fórmula (Connelly, 2005). En la Tabla 4.1 se comparan las fórmulas empíricas y moleculares de varios compuestos químicos.

La formulación de los compuestos químicos involucra el conocimiento de las funciones químicas, es decir el conjunto de sustancias con propiedades similares como son: los óxidos, hidruros, peróxidos, los ácidos, las bases o hidróxidos y las sales. Las teorías que describen los comportamientos de los ácidos y las bases se discuten en el capítulo 7 de este libro.

Asimismo, es necesario conocer los estados o números de oxidación típicos de los elementos. Este concepto se discutirá en detalle en el capítulo 5 por lo cual, aquí sencillamente diremos que es la carga positiva o negativa que puede adquirir un átomo cuando se encuentra combinado con otros elementos.

Tabla 4.1. Fórmulas empíricas y moleculares

Fórmula molecular	Fórmula empírica
S ₈	S
S ₂ Cl ₂	ClS
H ₄ P ₂ O ₆	H ₂ O ₃ P
Hg ₂ Cl ₂	ClHg
N ₂ O ₄	NO ₂
HOCN	CHNO

A continuación, se listan los estados de oxidación más frecuentes de algunos elementos y compuestos típicos:

1. El hidrógeno posee en general estado de oxidación (+1).
2. El hidrógeno combinado con un metal presenta estado de oxidación (-1). Estos compuestos se denominan *hidruros metálicos* como son el hidruro de sodio, NaH, el hidruro de litio, LiH, el hidruro de calcio, CaH₂ y el hidruro de estroncio, SrH₂.
3. Los elementos alcalinos del grupo 1A presentan estado de oxidación (+1).
4. Los elementos alcalinos térreos del grupo 2A presentan estado de oxidación (+2).
5. Los metales poseen varios estados de oxidación positivos. Por ejemplo, el cobre (+1, +2); hierro, cobalto y níquel (+2; +3); cromo (+2, +3, +6), etc.
6. Los halógenos del grupo 7A poseen estado de oxidación (-1) cuando están combinados con elementos menos electronegativos como el hidrógeno y elementos metálicos formando los *halogenuros o haluros*. El fluoruro de hidrógeno, HF, cloruro de hidrógeno, HCl, bromuro de hidrógeno, HBr y el yoduro de hidrógeno, HI, son gaseosos en condiciones estándar. Estos gases disueltos en solución acuosa, se denominan *hidrácidos* (tabla 4.2). Son sustancias ácidas debido a su capacidad para liberar protones H⁺ en solución, como se discutirá en el capítulo 7.

7. Los halógenos también forman *oxoácidos* y *oxoaniones* con múltiples estados de oxidación positivos (+1, +3, +5, +7). Los oxoácidos son compuestos ternarios que contienen un elemento no metálico, oxígeno e hidrógeno. Por ejemplo, el oxoácido del bromo con estado de oxidación (+5) es el ácido brómico, HBrO_3 , y el oxoanión bromato, BrO_3^- , se genera por la pérdida del átomo de hidrógeno como protón, H^+ . La Tabla 4.3. muestra los oxoácidos y oxoaniones del cloro.

8. El oxígeno presenta generalmente el estado de oxidación (-2). Se combina con metales para generar *óxidos metálicos* (también llamados *óxidos básicos*) como el óxido de sodio, Na_2O , óxido de calcio, CaO , y óxido de litio, Li_2O . Estos óxidos reaccionan con agua para generar los *hidróxidos* o *bases* como el hidróxido de sodio, NaOH , hidróxido de calcio, $\text{Ca}(\text{OH})_2$, y el hidróxido de litio, LiOH .

Además, el oxígeno se combina con elementos no metálicos formando los *óxidos no metálicos* también, llamados *óxidos ácidos*. Entre ellos podemos nombrar: el óxido de azufre (II), SO , dióxido de azufre, SO_2 , y trióxido de azufre, SO_3 . Estos óxidos se combinan con agua para dar los oxoácidos.

9. El oxígeno adquiere estado de oxidación es (-1) cuando forma peróxidos como el peróxido de hidrógeno, H_2O_2 , peróxido de sodio, Na_2O_2 , y el peróxido de bario, BaO_2 .

10. El estado de oxidación del azufre puede ser negativo (-2) o positivo (+2, +4, +6) dependiendo de la electronegatividad del elemento con que esté combinado. Por ejemplo, si está combinado con hidrógeno o elementos metálicos, adquiere estado de oxidación (-2) como en el sulfuro de hidrógeno, H_2S , y el sulfuro de sodio, Na_2S . Sin embargo, si está combinado con oxígeno (más electronegativo que el azufre) presenta estados de oxidación positivos como ocurre en los óxidos no metálicos.

11. El nitrógeno presenta estados de oxidación (+1, +2, +3, +4, +5) y (-3). Combinado con oxígeno presenta estados de oxidación positivos como en el monóxido de dinitrógeno, N_2O , monóxido de nitrógeno, NO , dióxido de nitrógeno, NO_2 y el ácido nítrico, HNO_3 .

12. El estado de oxidación del carbono es (+4).

En el caso de las fórmulas de los compuestos binarios, se coloca en primer lugar (de izquierda a derecha) el elemento menos electronegativo y el número de átomos se indica con un subíndice. Cada átomo tendrá un subíndice que es el estado de oxidación del otro elemento con el que está combinado como se muestra en el ejercicio tipo 4.1. La fórmula de un compuesto neutro contendrá una cantidad de especies con carga positiva (cationes) y una cantidad de especies con carga negativa (aniones), de forma tal que la sumatoria sea nula. Sin embargo, si se trata de un ion, la sumatoria de las cargas debe ser igual a la carga del mismo.

Ejercicio tipo 4.1. Escribí la fórmula molecular de los compuestos binarios que se podrían formar entre el hierro y el azufre.

Resolución

El hierro es un elemento metálico que puede tener estados de oxidación (+2) y (+3). Mientras que el azufre es un no metal que adquirirá estado de oxidación (-2). Por lo tanto, es posible obtener dos compuestos entre estos elementos combinando los iones de forma tal que las cargas se anulen. Un ion Fe^{2+} tiene una carga +2 y un ión S^{2-} tiene una carga -2. La cantidad de cargas positivas es igual a las negativas, entonces la fórmula es FeS .

Luego, un ion Fe^{3+} tiene carga +3 así que se requieren dos iones para un total de +6 cargas y tres iones S^{2-} para anularlas. Así, la fórmula será Fe_2S_3 . Vemos que cada átomo lleva como subíndice el estado de oxidación de aquel con el que está combinado.

En el caso de los oxoácidos, existe un orden tradicional de los elementos en sus fórmulas en el que los átomos de hidrógeno "reemplazables" (átomos de hidrógeno unidos al oxígeno) se enumeran primero, seguidos del átomo central y finalmente el oxígeno. La fórmula general de los oxoácidos es H_mXO_n donde el hidrógeno tiene estado de oxidación (+1), el átomo central X tiene estado de oxidación positivo y el oxígeno (-2). Para construir la fórmula, colocamos primero el átomo central X^{a+} , luego se adicionan átomos de oxígeno para superar las cargas positivas ($a+$) y finalmente, se agregan átomos de hidrógeno para neutralizar el exceso de carga negativa. El ejercicio tipo 4.2. muestra la construcción de un oxoácido según ese método.

Ejercicio tipo 4.2. Escribí la fórmula del oxoácido correspondiente al azufre con estado de oxidación (+6).

Resolución

El azufre es el átomo central S^{6+} y aporta seis cargas positivas. Se necesitan 4 iones O^{2-} para superar las cargas positivas del átomo central. Quedan dos cargas negativas que se neutralizan con dos átomos de hidrógeno. La fórmula es H_2SO_4 .

Según comentamos antes, los óxidos básicos se combinan con agua para generar los hidróxidos cuya fórmula general es $\text{M}(\text{OH})_n$ donde M^{n+} es un metal y el grupo OH^- se denomina ion oxhidrilo o hidroxilo.

Los hidróxidos reaccionan con ácidos para dar una sal y agua, como discutiremos en el Capítulo 7. La fórmula de las sales se construye con los aniones que provienen del ácido (hidrácidos y oxoácidos) y con los cationes provenientes de hidróxidos, formando compuestos neutros. El principio de ordenamiento de los iones en la fórmula es: (i) todos los constituyentes electropositivos preceden a todos los constituyentes electronegativos; (ii) dentro de cada uno de los dos grupos de componentes, se utiliza el orden alfabético.

Ejercicio tipo 4.3. Escribí la fórmula de la sal que se forma por la reacción de NaOH y HCl.

Resolución

La reacción del hidróxido de sodio y el ácido HCl produce agua y una sal constituida por el catión Na^+ y el anión Cl^- , cuya fórmula es NaCl.

Algunos ejemplos de fórmulas de sales son:

1. CuSO_4
2. $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$
3. $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$
4. $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$
5. MgF_2
6. CoCl_2

El compuesto $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ corresponde a una sal que posee agua (denominada sal hidratada o hidrato). En estos casos el agua está separada de la fórmula del compuesto por un punto. De este mismo modo, se expresan las sales dobles ($\text{BF}_3 \cdot \text{NH}_3$) y los óxidos dobles ($\text{Ta}_2\text{O}_5 \cdot 4\text{WO}_3$) llamados compuestos de adición.

En los ejemplos 3 y 4 se observan fórmulas de sales que poseen paréntesis: $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ y $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$. El paréntesis se utiliza para incluir grupos de átomos (los grupos pueden ser iones, grupos sustituyentes, ligandos o moléculas), para evitar ambigüedades o cuando el grupo posee un subíndice.

Ejercicio tipo 4.4. Escribí la fórmula de la sal que se podría formar por la reacción de $\text{Al}(\text{OH})_3$ y HNO_3 .

Resolución

El ácido nítrico HNO_3 genera el oxoanión nitrato NO_3^- (ver la Tabla 4.2). El hidróxido de aluminio produce el catión Al^{3+} que tiene tres cargas positivas por lo cual, son necesarios tres oxoaniones para neutralizarlas. La fórmula de la sal es $\text{Al}(\text{NO}_3)_3$.

La carga de un ion se indica con un superíndice ubicado en la parte superior derecha como: A^{n+} y A^{n-} (notar que la notación A^{+n} y A^{-n} es incorrecta). La carga de los iones compuestos por dos o más elementos que constituyen entidades de coordinación en una sustancia, se escriben entre corchetes y la carga se indica con un superíndice según se explicó anteriormente. Por ejemplo:

1. Cu^+
2. Cu^{2+}
3. NO^+
4. $[\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$

5. As^{3-}
6. CN^-
7. $\text{S}_2\text{O}_7^{2-}$

Fórmula empírica y fórmula molecular

Como se mencionó previamente, un compuesto puede escribirse en su formato de fórmula empírica, también llamada mínima, o de fórmula molecular. La fórmula empírica, que expresa la mínima relación de números enteros de moles de átomos de cada elemento que existe en una determinada sustancia, puede establecerse a partir de los datos experimentales de composición centesimal de cualquier compuesto desconocido, que se obtienen por ejemplo, mediante las técnicas conocidas como *gravimetrías* (*gravis*: pesado; *metros*: medición). El ejercicio tipo 4.5 muestra el cálculo de las fórmulas mínima y molecular a partir de los porcentajes de los elementos.

Puede ocurrir que dos sustancias diferentes compartan una misma fórmula empírica. Es el caso de ciertos hidrocarburos insaturados:

Propeno, C_3H_6

Buteno, C_4H_8 \rightarrow comparten la fórmula empírica CH_2

Penteno, C_5H_{10}

Si calculamos la razón entre la masa molar de cada hidrocarburo y la masa de su fórmula empírica, hallaremos un número entero que, al multiplicar los coeficientes de la fórmula empírica, permite obtener la fórmula molecular:

$$\frac{\text{masa molar del propeno}}{\text{masa de } \text{CH}_2} = \frac{42 \text{ g}}{14 \text{ g}} = 3 \quad \rightarrow \quad (\text{CH}_2) \times 3 = \mathbf{C_3H_6}$$

$$\frac{\text{masa molar del buteno}}{\text{masa de } \text{CH}_2} = \frac{56 \text{ g}}{14 \text{ g}} = 4 \quad \rightarrow \quad (\text{CH}_2) \times 4 = \mathbf{C_4H_8}$$

$$\frac{\text{masa molar del penteno}}{\text{masa de } \text{CH}_2} = \frac{70 \text{ g}}{14 \text{ g}} = 5 \quad \rightarrow \quad (\text{CH}_2) \times 5 = \mathbf{C_5H_{10}}$$

Ejercicio tipo 4.5. Al realizar el análisis gravimétrico de un determinado compuesto químico, se ha encontrado la siguiente composición centesimal: 69,98 % en Ag; 16,22 % en As; 13,80 % en O. Determinar su fórmula empírica. Si la masa molar de la sustancia es 463,0 g, ¿cuál es su fórmula molecular?

Resolución

Los datos de composición centesimal que nos brinda el enunciado pueden interpretarse de la siguiente manera:

Cada 100 g del compuesto → 69,98 g son de Ag
 → 16,22 g son de As
 → 13,80 g son de O

Para la determinación de la fórmula empírica, debemos expresar estas masas en términos de moles de átomos de cada elemento. A este fin, dividimos las masas de cada elemento por su respectiva masa atómica (MA):

$$\frac{69,98 \text{ g de Ag}}{MA \text{ Ag}} = \frac{69,98 \text{ g de Ag}}{108 \text{ g/mol}} = 0,6480 \text{ moles de Ag}$$

$$\frac{16,22 \text{ g de As}}{MA \text{ As}} = \frac{16,22 \text{ g de As}}{75 \text{ g/mol}} = 0,2263 \text{ moles de As}$$

$$\frac{13,80 \text{ g de O}}{MA \text{ O}} = \frac{13,80 \text{ g de O}}{16 \text{ g/mol}} = 0,8625 \text{ moles de O}$$

Para encontrar la proporción en moles de los elementos en el compuesto y obtener así la fórmula empírica, se deben relacionar las cantidades de moles presentes en la sustancia. Una forma sencilla de hacerlo es buscar el cociente entre los moles de cada elemento presentes en 100 g de compuesto y los moles de aquel compuesto presente en menor proporción, que en nuestro ejemplo es el As:

$$\frac{0,6480 \text{ moles de Ag}}{0,2263 \text{ moles}} = 2,863 \Rightarrow 3$$

$$\frac{0,2263 \text{ moles de As}}{0,2263 \text{ moles}} = 1 \Rightarrow 1$$

$$\frac{0,8625 \text{ moles de O}}{0,2263 \text{ moles}} = 3,811 \Rightarrow 4$$

Notar que el resultado de esta operación se redondea al número entero más cercano, ya que los moles de átomos en los compuestos se combinan en números enteros. De acuerdo con los cálculos, la *fórmula empírica* del compuesto analizado es: Ag_3AsO_4 .

Luego, a partir de la masa molar (peso molecular) del compuesto estudiado, es posible averiguar su fórmula molecular. Para ello, se busca la relación entre las masas de estas fórmulas, de forma de encontrar cuántas veces se encuentra la fórmula empírica contenida en la fórmula molecular. De acuerdo con el enunciado, la masa molar del compuesto desconocido es 463 g/mol:

$$\frac{463 \text{ g}}{(3 \times 108 + 75 + 4 \times 16) \text{ g}} = \frac{463 \text{ g}}{463 \text{ g}} = 1$$

En este caso, las fórmulas empírica y molecular coinciden, el compuesto es Ag_3AsO_4 .

Nomenclatura de compuestos inorgánicos

De acuerdo con la IUPAC hay tres sistemas de nomenclatura que son de importancia primordial en la química inorgánica. En este sentido, las metodologías utilizadas para nombrar las sustancias químicas se denominan: nomenclatura de composición, de adición y de sustitución.

La **nomenclatura de composición** se fundamenta en la estequiometría de la sustancia (Connelly, 2005). En este caso, los componentes de la sustancia ya sean elementos o iones poliatómicos, se nombran con prefijos numéricos que brindan información de la fórmula empírica o molecular del compuesto.

En el caso de los compuestos binarios se nombra primero el elemento electronegativo (con la terminación “uro”) y luego el elemento electropositivo. Ambos nombres estarán afectados por prefijos multiplicadores (mono, di, tri, tetra, penta, etc.) que indican la cantidad de estos elementos en la fórmula.

Los siguientes son ejemplos típicos de este sistema de nomenclatura:

1. Trioxígeno, O_3
2. Cloruro de sodio, $NaCl$
3. Tricloruro de fósforo, PCl_3
4. Pentabismuturo de trisodio, Na_3Bi_5
5. Cianuro de sodio, $NaCN$
6. Cloruro de amonio, NH_4Cl
7. Óxido de nitrógeno o monóxido de nitrógeno, NO
8. Tetraóxido de trihierro, Fe_3O_4

El nombre de un catión monoatómico es el del elemento con la carga entre paréntesis. Mientras que los cationes poliatómicos, se nombran colocando el prefijo multiplicador al nombre del elemento neutro. Veamos algunos ejemplos:

1. Cr^{3+} , cromo(3+)
2. H^+ , hidrógeno(1+)
3. Hg_2^{2+} , dimercurio(2+)
4. S_4^{2+} , tetraazufre(2+)

Algunos pocos cationes heteropoliatómicos poseen nombres vulgares no sistemáticos que son aceptados como el amonio NH_4^+ y el oxonio H_3O^+ (comúnmente denominado hidronio).

Los nombres de los aniones (especies monoatómicas o poliatómicas con una o más cargas negativas) terminan en: “uro”, si el anión proviene de un hidruro; “ato”, si proviene de una especie heteropoliatómica nombrada por adición, y en algunos pocos casos se utiliza la terminación “ito”. La carga del anión se indica entre paréntesis con la excepción de los aniones monoatómicos en los que la indicación de la carga puede obviarse como se verá en los siguientes ejemplos.

La **nomenclatura de adición** considera que las sustancias están formadas por un átomo (o átomos) central rodeado de otros grupos elementos denominados ligandos, por lo tanto, el nombre de los compuestos se construye colocando el nombre de los ligandos como prefijos del nombre del átomo o átomos central/les.

A continuación, se presentan las fórmulas y nombres de algunos aniones comunes. En algunos casos hay nombres alternativos que no se ajustan a las reglas de nomenclatura pero que son aceptados por la IUPAC y se utilizan habitualmente. Estos serán discutidos más adelante.

1. NO_2^- , dioxidonitrato(1-), o nitrito
2. S_2^{2-} , disulfuro(2-)
3. Cl^- , cloruro
4. O^{2-} , óxido(2-), u óxido
5. N^{3-} , nitruro(3-), o nitruro
6. O_2^- , dióxido(1-), o superóxido (nombre alternativo aceptado por la IUPAC).
7. O_2^{2-} , dióxido(2-), o peróxido (nombre alternativo aceptado por la IUPAC).
8. I_3^- , triyoduro(1-)
9. HCO_3^- , hidrogeno(trioxidocarbonato)(1-), o hidrogenocarbonato
10. $\text{H}_2\text{PO}_4^{2-}$, dihidrogeno(tetraoxidofosfato)(2-), o dihidrogenofosfato
11. SO_3^{2-} , trióxidosulfato(2-), o sulfito (aceptado y no sistemático)
12. ClO^- , clorurooxigenato(1-), o hipoclorito (aceptado y no sistemático)
13. ClO_3^- , trioxidoclorato(1-), o clorato (aceptado y no sistemático)

El sistema de **nomenclatura basado en la composición** de una sustancia (sistema estequiométrico), puede generalizarse para nombrar los compuestos (de dos o más componentes) considerando que los nombres de los constituyentes electronegativos (aniones) del compuesto preceden a los electropositivos (cationes) en el nombre completo. Si hay varios componentes electropositivos y/o electronegativos, se nombran en orden alfabético, con excepción del hidrógeno, que se indica al final de los constituyentes electropositivos si se encuentra actuando como tal. Asimismo, la proporción de los constituyentes se indica con prefijos multiplicadores, como se discutió anteriormente para los compuestos binarios. Veamos algunos ejemplos:

1. Na_2CO_3 , trioxidocarbonato de disodio, o carbonato de sodio
2. IBr , bromuro de yodo
3. KMgCl_3 , tricloruro de magnesio y potasio
4. $\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2$, bis(hidrogenocarbonato) de calcio

Una metodología adicional para nombrar los compuestos es a través de la indicación del número de carga, que es un número cuya magnitud es la carga iónica o bien el estado (número) de

oxidación. Este último se indica con números romanos entre paréntesis inmediatamente después del nombre del elemento. Por ejemplo:

1. N_2O , óxido de nitrógeno(I)
2. MnO_2 , óxido de manganeso(IV)
3. FeSO_4 , sulfato de hierro(II)
4. $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$, sulfato de hierro(III)
5. SF_6 , fluoruro de azufre(VI)
6. HgCl_2 , cloruro de mercurio(II)

Nomenclatura de los hidrácidos, oxoácidos y oxoaniones

Según se discutió anteriormente, los haluros disueltos en solución acuosa tienen propiedades ácidas. Estos compuestos, denominados hidrácidos, se nombran anteponiendo la palabra “ácido” y reemplazando la terminación “uro” del elemento por “hídrico”. La Tabla 4.2. muestra la fórmula y los nombres de los hidrácidos.

Tabla 4.2. Fórmulas y nombres de los hidrácidos

Hidrácido	Nombre
HF	ácido fluorhídrico
HCl	ácido clorhídrico
HBr	ácido bromhídrico
HI	ácido yodhídrico
H_2S	ácido sulfhídrico

Los oxoácidos y los oxoaniones derivados de ellos, pueden nombrarse a partir de las reglas de la nomenclatura estequiométrica sistemática que se discutieron en la sección anterior. Sin embargo, la IUPAC acepta nombres comunes de los oxoácidos que contienen la palabra “ácido” y que utilizan prefijos (“*per*” e “*hipo*”) y sufijos (“*oso*” e “*ico*”), y sus combinaciones, para indicar el estado de oxidación del átomo central. En la siguiente tabla se presentan los nombres de algunos oxoácidos comunes y los oxoaniones que se derivan de ellos.

Según se aprecia en la Tabla 4.3, en el caso de un átomo central con múltiples estados de oxidación (como es el caso de los halógenos), el nombre del oxoácido con mayor estado de oxidación (típicamente +7) contendrá el prefijo “*per*” y el sufijo “*ico*”. Mientras que el oxoácido, con el menor estado de oxidación (típicamente +1) presenta el prefijo “*hipo*” y el sufijo “*oso*”. Los compuestos con los estados de oxidación intermedios (o aquellos oxoácidos cuyo átomo central poseen dos estados de oxidación posible) contendrán los sufijos “*ico*” y “*oso*”.

Los oxoaniones derivados de los ácidos cuyo nombre termina en “oso” o “íco” se nombran con el sufijo “ito” o “ato”, respectivamente (se mantienen los prefijos “hipo” y “per”).

Algunos oxoaniones con propiedades redox (como se discutirá en el capítulo 8) son:

1. MnO_4^- , permanganato
2. CrO_4^{2-} , cromato
3. $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$, dicromato
4. $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$, tiosulfato
5. $\text{S}_4\text{O}_6^{4-}$, tetrionato

Tabla 4.3. Fórmulas y nombres de los oxoácidos más comunes y sus oxoaniones derivados

oxoácido	Nombre	oxoanión	nombre
HClO_4	ácido perclórico	ClO_4^-	perclorato
HClO_3	ácido clórico	ClO_3^-	clorato
HClO_2	ácido cloroso	ClO_2^-	clorito
HClO	ácido hipocloroso	ClO^-	hipoclorito
H_2SO_4	ácido sulfúrico	HSO_4^-	hidrogenosulfato
		SO_4^{2-}	sulfato
H_2SO_3	ácido sulfuroso	HSO_3^-	hidrogenosulfito
		SO_3^{2-}	sulfito
H_2CO_3	ácido carbónico	HCO_3^-	hidrogenocarbonato
		CO_3^{2-}	carbonato
HNO_3	ácido nítrico	NO_3^-	nitrato
HNO_2	ácido nitroso	NO_2^-	nitrito
H_3PO_4	ácido fosfórico	H_2PO_4^-	dihidrogenofosfato
		HPO_4^{2-}	hidrogenofosfato
		PO_4^{3-}	fosfato
H_3PO_3	ácido fosforoso	H_2PO_3^-	hihidrogenofosfito
		HPO_3^{2-}	hidrogenofosfito
		PO_3^{3-}	fosfito

Ejercicio propuesto 4.1. Completá la siguiente tabla con las fórmulas o el nombre de los compuestos según corresponda.

Compuesto	Nombre
	Sulfato ferroso
NO_2	
	Hidróxido de amonio
	Arseniato de potasio
NiH_2	
$\text{Co}(\text{OH})_3$	
	Óxido áurico
KMnO_4	
	Óxido de plomo(IV)
Li_3PO_4	
	Hidrogeno sulfuro de sodio
	Hidróxido mercúrico
FeS	
$\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$	
	Carbonato de calcio
	Ácido clórico
BaO	
HIO	
	Dicromato de potasio
Na_2HPO_3	
	Nitrito de níquel (II)
	Trióxido de diarsénico
	Hidrógeno sulfato de magnesio
	Peryodato de cesio
NH_3	

Ejercicio propuesto 4.2. Escribí la fórmula de las siguientes sales.

Nombre	fórmula
Nitrito de bario	
Hidrogeno sulfito de sodio	
Cloruro de hierro (III)	
Fluoruro cúprico	
Dihidrógeno fosfato de aluminio	
Nitrato de níquel (III)	
Sulfato mercurioso	

Ejercicio propuesto 4.3. Escribí el nombre clásico de los siguientes oxoaniones.

anión	nombre
SO_4^{2-}	
SO_3^{2-}	
NO_3^-	
NO_2^-	
HPO_4^{2-}	
HSO_4^-	
HSO_3^-	
H_2PO_4^-	

Ejercicio propuesto 4.4. Escribí la fórmula y el nombre de todos los oxácidos formados por el bromo.

Número de oxidación	fórmula	nombre

Respuestas de los ejercicios propuestos

Ejercicio propuesto 4.1.

Compuesto	Nombre
FeSO_4	Sulfato ferroso
NO_2	óxido de nitrógeno(IV)
NH_4OH	Hidróxido de amonio
K_3AsO_3	Arseniato de potasio
NiH_2	Hidruro de níquel(II)
$\text{Co}(\text{OH})_3$	Hidróxido de cobalto(III)
Au_2O_3	Óxido áurico
KMnO_4	Permanganato de potasio
PbO_2	Óxido de plomo(IV)
Li_3PO_4	Fosfato de litio

NaHS	Hidrogeno sulfuro de sodio
Hg(OH)₂	Hidróxido mercúrico
FeS	Sulfuro de hierro(II)
Cu(NO₃)₂	Nitrato de cobre(II)
CaCO₃	Carbonato de calcio
HClO₃	Ácido clórico
BaO	Óxido de bario
HIO	Ácido hipoyodoso
K₂Cr₂O₇	Dicromato de potasio
Na₂HPO₃	Hidrogeno fosfito de sodio
Ni(NO₂)₂	Nitrito de níquel (II)
As₂O₃	Trióxido de diarsénico
Mg(HSO₄)₂	Hidrógeno sulfato de magnesio
Cs(IO₄)	Peryodato de cesio
NH₃	amoníaco

Ejercicio propuesto 4.2.

Nombre	fórmula
Nitrito de bario	Ba(NO₂)₂
Hidrogeno sulfito de sodio	NaHSO₃
Cloruro de hierro(III)	FeCl₃
Fluoruro cúprico	CuF₂
Dihidrógeno fosfato de aluminio	Al(H₂PO₄)₃
Nitrato de níquel(III)	Ni(NO₃)₃
Sulfato mercurioso	Hg₂SO₄

Ejercicio propuesto 4.3.

Nombre	fórmula
SO₄²⁻	Sulfato
SO₃²⁻	Sulfito
NO₃⁻	Nitrato
NO₂⁻	Nitrito
HPO₄²⁻	Hidrógeno fosfato
HSO₄⁻	Hidrógeno sulfato
HSO₃⁻	Hidrogeno sulfito
H₂PO₄⁻	Dihidrógeno fosfato

Ejercicio propuesto 4.4.

Número de oxidación	fórmula	nombre
+1	HBrO	Ácido hipobromoso
+3	HBrO ₂	Ácido bromoso
+5	HBrO ₃	Ácido brómico
+7	HBrO ₄	Ácido perbrómico

Referencias

Fabbrizzi, L. (2008). Communicating about matter with symbols: evolving from alchemy to chemistry. *Journal of Chemical Education*, 85, 1501-1511.

IUPAC, International Union of Pure and Applied Chemistry. Recuperado de <https://www.iupac.org>.

Connelly, N.G., Damhus, T., Hartshorn, R. M., Hutton, A. T. (2005). Nomenclature of Inorganic Compounds. IUPAC recommendations. Gran Bretaña: RSC Publishing.

CAPÍTULO 5

Estructura y geometría molecular

Laura E. Briand y Virginia Vetere

En este capítulo estudiaremos cómo se relaciona la estructura electrónica de los átomos con las fuerzas que los mantienen unidos cuando forman una especie química. Analizaremos cómo los electrones de valencia, descritos en el capítulo 3, participarán de distintos tipos de **enlaces químicos** o permanecerán como pares de electrones libres alrededor de los átomos.

Representaremos las moléculas e iones de forma simple a través de las denominadas **estructuras de Lewis** que nos permitirán conocer el arreglo de átomos en una especie química. Finalmente, estudiaremos y aplicaremos un modelo sencillo, basado en la repulsión de los pares de electrones de valencia, que nos conducirá a la predicción de la forma tridimensional de las moléculas, esto es, a su **geometría molecular**.

La forma y el tamaño de las moléculas, su polaridad y la fuerza de sus enlaces son de gran importancia en química ya que determinan las propiedades fisicoquímicas de las sustancias.

Lectura inicial

Diseño racional de fármacos: el encuentro entre la informática y la química

La investigación y desarrollo de nuevos fármacos es un proceso complejo y en constante evolución. Tradicionalmente, el diseño de fármacos se ha enfocado en productos de origen natural que, de ser necesario, pueden modificarse químicamente. En la actualidad, debido a la existencia de computadoras cada vez más eficientes, se ha abierto un nuevo panorama para la industria farmacéutica, que permite el diseño y modelado molecular de compuestos con potencial actividad biológica y su posterior optimización hasta lograr los más promisorios para su aplicación farmacológica. De este modo, es posible simular la interacción de compuestos químicos en procesos biológicos, comparando de forma sistemática las geometrías moleculares, las propiedades físicas y químicas que de ellas derivan y su potencial efectividad farmacológica. Es importante destacar que, si bien el desarrollo de fármacos asistido por computadoras permite diseñar, optimizar y seleccionar compuestos con potencial actividad con un ahorro importante en tiempo y dinero, los modelos computacionales deben validarse con pruebas experimentales muy rigurosas (Medina-Franco y col., 2015).

¿Por qué es importante la geometría molecular en el diseño de fármacos? El diseño racional de fármacos comienza con el estudio biológico de alguna patología. Mediante el uso de técnicas computacionales, de biología molecular y de análisis de estructuras moleculares, se logra definir las especies químicas implicadas en la enfermedad, lo que posibilita diseñar medicamentos que interactúen de manera específica con estas y conduzcan a un potencial tratamiento efectivo.

Los procesos biológicos son muy sensibles a la geometría de las moléculas. En los seres vivos, los aminoácidos, las enzimas, los anticuerpos, las hormonas, el ADN, etc. poseen distribuciones espaciales muy específicas. Estas moléculas pueden interactuar de manera marcadamente distinta con compuestos de diferente geometría molecular, incluso con aquellos cuyas diferencias en su forma tridimensional sean, en apariencia, muy sutiles.

Para visualizar la sensibilidad de los procesos biológicos hacia la geometría molecular, tomemos el ejemplo del fármaco ibuprofeno, un analgésico, antipirético y antiinflamatorio no esteroide, extensamente utilizado en todo el mundo. El modo más común de administración de este fármaco es a través de una mezcla, denominada mezcla racémica, que contiene cantidades similares de las dos formas moleculares mostradas en la figura 5.1, conocidas como enantiómeros (S)-ibuprofeno y (R)-ibuprofeno. Como puede observarse en la figura, una molécula es la imagen espejular de la otra, tal como nuestras manos izquierda y derecha. A pesar de esta “sutil” diferencia en la geometría molecular, la forma S de la molécula resulta ser significativamente más efectiva en su actividad biológica que la R (Evans, 2001).

Este y otros ejemplos han hecho que la industria, no sólo farmacéutica, sino también alimenticia y agroquímica, busquen distintas estrategias para lograr comercializar compuestos puros, de geometrías moleculares muy específicas.

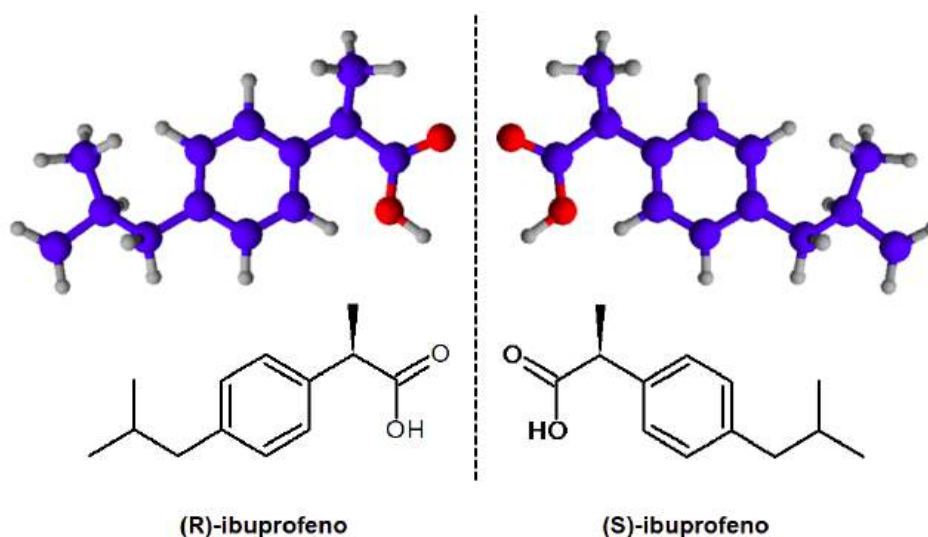


Figura 5.1. Representación de la estructura y geometría molecular de los enantiómeros del ibuprofeno.

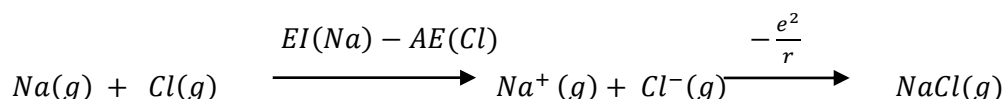
Enlaces químicos

Un **enlace químico** puede considerarse como la fuerza que actúa entre átomos o grupos de átomos y conduce a la formación de una molécula o especie química estable e independiente. La característica principal de un enlace químico es la existencia de una región entre los núcleos de los átomos intervinientes, donde se presentan interacciones en las que participan los electrones de valencia, los de las capas más externas de los átomos. Los enlaces químicos pueden clasificarse en tres grandes grupos: iónicos, covalentes y metálicos.

Los **enlaces iónicos** resultan de las atracciones entre iones de carga opuesta, y están presentes en la mayoría de los sólidos cristalinos. De forma simplificada, en este modelo los iones se forman a partir de la transferencia de uno o más electrones de un átomo a otro. Este tipo de enlaces se dan generalmente entre metales y no metales, especialmente entre aquellos ubicados en el extremo izquierdo y derecho de la tabla periódica. Un ejemplo típico de sustancia iónica es el NaCl, componente principal de la sal de mesa común.

Analizaremos este ejemplo más en detalle. En un solo cristal de NaCl, cada átomo de sodio está rodeado por seis átomos de cloro, y viceversa. Por esta razón y para simplificar la discusión, examinaremos el enlace del cloruro de sodio en estado gaseoso (DeKock, 1987). Esta especie gaseosa solo existe si el cristal se calienta a elevada temperatura bajo vacío.

En una primera etapa, la formación del enlace en el NaCl(g) se describe a partir de la transferencia de un electrón desde el átomo de sodio al de cloro, ambos neutros, y en estado gaseoso. La energía involucrada se calcula como la diferencia entre la energía de ionización del sodio, $EI(\text{Na})$, y la afinidad electrónica del cloro, $AE(\text{Cl})$. Además, los iones con carga opuesta (que en este modelo se consideran cargas puntuales) se atraen de acuerdo con la denominada ley de Coulomb, cuya expresión se observa en la ecuación que se presenta a continuación (donde e es la carga de electrón y r es la distancia entre los iones).



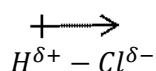
A través de este ciclo termoquímico, es posible calcular la energía involucrada en la formación del enlace que resulta igual a $-105,4 \text{ kcal.mol}^{-1}$. La energía es negativa porque el producto es más estable que los reactivos, razón por la cual se establece el enlace iónico que conduce a la especie NaCl.

En el cálculo anterior, asumimos que la transferencia de un electrón entre el átomo de Na y el átomo de Cl es completa. Sin embargo, todos los enlaces químicos tienen una transferencia parcial de carga electrónica. Esta transferencia de carga está relacionada directamente con la electronegatividad de los átomos involucrados, como lo muestra la siguiente ecuación:

$$f_i = \frac{x_a - x_b}{x_a}$$

Esta ecuación permite calcular la fracción de carácter iónico de un enlace (f_i), a partir de las electronegatividades x_A y x_B de los átomos A y B, respectivamente, donde A es el elemento más electronegativo. Si multiplicamos f_i por 100 obtenemos el porcentaje de carácter iónico del enlace. A partir de esta fórmula es posible concluir que para una molécula hipotética con $x_B = 0$, obtenemos 100% carácter iónico. Si $x_A = x_B$ obtenemos una molécula con 0% de carácter iónico. Para el caso de NaCl, si se emplean las electronegatividades típicas de 3,16 para Cl y 0,93 para Na, se obtiene una 70% de carácter iónico.

El modelo del **enlace covalente** asume que los átomos se mantienen unidos porque comparten una densidad de electrones, esto es uno o más pares de electrones (Gillespie, 2001). Este tipo de uniones se presenta entre átomos de elementos no metálicos. Según G. N. Lewis, un par de electrones se comparte si se usa para completar la capa de valencia de ambos átomos enlazados, lo que les confiere una estructura estable. En términos de la densidad electrónica de una molécula, el significado de "compartir" no es tan claro. Generalmente, se refiere a que en un enlace covalente se acumula densidad de electrones entre los dos átomos y es la atracción electrostática entre esta densidad y los núcleos la que mantiene a los átomos unidos. Los únicos enlaces puramente covalentes son aquellos entre átomos idénticos en moléculas simétricas como, por ejemplo, el enlace H-H en la molécula H_2 , el enlace C-C en el etano, C_2H_6 , y el enlace Si-Si en el disilano, S_2H_4 . Por lo tanto, la gran mayoría de los enlaces tienen un carácter intermedio entre el iónico y el covalente. Dichos enlaces generalmente se describen como covalentes polares. En este tipo de uniones, hay cargas parciales sobre los átomos enlazados que dependen de la electronegatividad de los mismos. Así, habrá una pequeña carga neta negativa sobre el átomo más electronegativo, que atrae parte de la densidad electrónica, y una pequeña carga neta positiva sobre el átomo menos electronegativo. Por ejemplo, para el cloruro de hidrógeno, las cargas parciales se representan como $H^{\delta+} - Cl^{\delta-}$, donde δ^+ y δ^- indican las cargas parciales positiva y negativa, respectivamente. Los átomos forman un dipolo eléctrico que se representa con un vector que apunta hacia la carga parcial negativa y cuya magnitud es el momento dipolar μ .



La magnitud del momento dipolar se calcula a través de la ecuación: $\mu = Q r$, donde Q es la carga (generalmente se expresa como una fracción de la carga del electrón que es $1,60 \times 10^{-19}$ coulombios) y r la distancia que separa las cargas iguales y de distinto signo Q^+ y Q^- . La unidad del momento dipolar en el sistema internacional es el debye (D), que surge del producto entre la carga expresada en coulombios y la distancia en metros. De este modo, un debye equivale a $3,34 \times 10^{-30}$ coulombio-metro.

Los **enlaces metálicos**, de los que no nos ocuparemos en este libro, son los responsables de mantener unidos a los átomos en un metal. En este tipo de interacción los electrones de valencia se mueven libremente en toda la estructura tridimensional del metal.

Estructuras de Lewis

En el año 1916, Gilbert N. Lewis publicó un método pionero para representar la estructura de los iones y moléculas. Este método estaba fundamentado en lo que denominó *la teoría del átomo cúbico*, en la que consideró que los electrones se ubican en los vértices de un cubo y, por lo tanto, los átomos podían tener ocho electrones como máximo. Lewis postuló:

(...) el átomo está compuesto por el núcleo y una capa exterior, que, en el caso del átomo neutro, contiene electrones negativos iguales en número al exceso de cargas positivas del núcleo, pero el número de electrones en la cáscara pueden variar durante el cambio químico entre 0 y 8. El átomo tiende a contener un número par de electrones en la capa, y especialmente para contener ocho electrones que normalmente están dispuestos simétricamente en las ocho esquinas de un cubo (Lewis, 1916, p. 767).

Asimismo, Lewis indicó cómo representar las uniones químicas a través de puntos:

Para expresar esta idea de unión química en símbolos, sugeriría el uso de dos puntos, o dos puntos dispuestos de alguna otra manera, para representar los dos electrones que actúan como los enlaces de conexión entre los dos átomos. Por tanto, podemos escribir Cl_2 , como $\text{Cl} : \text{Cl}$.

Podemos ir más allá y dar una fórmula completa para cada compuesto utilizando el símbolo del núcleo en lugar del símbolo atómico ordinario y unir a cada símbolo un número de puntos correspondientes al número de electrones en la capa atómica.

Aún hoy en día, la metodología descrita por Lewis se utiliza para representar la estructura de los iones y las moléculas, considerando que los átomos tienden a estar rodeados por ocho electrones, lo que se conoce como la **regla del octeto**. Los gases nobles tienen un arreglo de electrones muy estable, como lo demuestra su baja reactividad química, sus altas energías de ionización y sus bajas afinidades electrónicas. Con excepción del He, los gases nobles tienen ocho electrones de valencia. De este modo, los átomos tienden a compartir, ganar o perder electrones de manera de adquirir la configuración del gas noble más cercano en la tabla periódica, con un octeto de electrones que llenan las subcapas *s* y *p*. De acuerdo con los símbolos de Lewis, un octeto puede representarse con cuatro pares de electrones de valencia alrededor del átomo, como por ejemplo en el Ne:



Las estructuras de Lewis se utilizan para predecir propiedades tales como la geometría molecular, los órdenes de enlace (número de pares electrónicos compartidos por dos átomos), las energías de enlace y momento dipolar.

Construcción de las estructuras de Lewis

La representación de las estructuras de moléculas y de iones a través del método de Lewis requiere conocer el grupo de la tabla periódica al que pertenecen cada uno de sus elementos. Esta información proporciona el número de electrones del nivel más externo de la configuración electrónica, los electrones de valencia, que son los que están disponibles para formar enlaces con otros átomos.

El procedimiento secuencial para la construcción de las estructuras de Lewis consta de los siguientes pasos (McArdle, 2019):

Paso 1: utilizando una tabla periódica, contar el número total de electrones de valencia para todos los átomos de la molécula o ion que se pretende representar. El recuento total de electrones debe incluir el efecto de cualquier carga general en la especie química. Por ejemplo, si se trata de un anión con carga -2, se sumarán dos electrones adicionales a los electrones de valencia, y si se trata de un catión con carga +1, entonces restaremos un electrón.

El número de electrones es a menudo par, y dividido por dos, da el número total de pares de electrones disponibles. Estos pares podrán formar parte de un enlace (pares enlazantes) o aparecer como pares solitarios o libres alrededor de los átomos (pares no enlazantes).

Paso 2: se representa el átomo central y los átomos que lo rodean (terminales), asumiendo una cierta conectividad entre ellos. El átomo central será aquel que esté unido a dos o más átomos y los terminales estarán unidos a un solo átomo, el central. El H y el F siempre son terminales. Los átomos se conectan con un enlace simple, representado por una línea, que involucra dos electrones. Los electrones restantes, que no han formado enlaces, se representan como pares libres o pares solitarios alrededor de los átomos. El objetivo es proveer de ocho electrones a cada uno de los átomos que conforman la especie química, excepto el hidrógeno, que tendrá dos electrones como máximo, y el berilio (Be), el boro (B) y el aluminio (Al), que son excepciones a la regla del octeto, como estudiaremos más adelante.

Una estrategia de utilidad para construir las estructuras de Lewis es, una vez que se unieron los átomos mediante enlaces simples, completar primero el octeto de los átomos terminales. Una vez hecho esto, se cuenta el número total de electrones distribuidos, tanto en los enlaces como libres, y se los compara con el número total de electrones de valencia disponibles. Los electrones provenientes de esta diferencia (electrones disponibles menos electrones distribuidos), se ubican en el átomo central, aún si en algunos casos supera el octeto, como veremos a continuación. Si mediante este procedimiento, el átomo central no consigue alcanzar su octeto, se forman enlaces múltiples con pares de electrones libres de los átomos terminales.

Una pregunta recurrente es cómo ubicar el átomo central de una molécula o ion, y cuáles son los átomos que lo rodean. En muchos casos resultará fácil identificarlo, por ejemplo, en la molécula de metano, CH_4 , el átomo central es el C y los H son los terminales. En el caso de los oxoácidos, el átomo central es el elemento no metálico (distinto de oxígeno) que está rodeado por átomos de oxígeno y, a estos últimos, se unen el o los átomos de hidrógeno.

A continuación, aplicaremos la metodología descrita más arriba para construir varias estructuras de Lewis con complejidad creciente y aprenderemos cómo elegir entre varias estructuras posibles.

Estructura de Lewis del metano, CH₄

Dado que el carbono tiene cuatro electrones de valencia (pertenece al grupo IVA o 14 de la tabla periódica) y el hidrógeno tiene un electrón, la cantidad de electrones disponibles es, en este caso, de 8 electrones (4 pares). El carbono es el átomo central y se une a través de 4 enlaces simples a los átomos de hidrógeno. La figura 5.2 muestra la estructura del metano con los enlaces simples representados por dos puntos (que indican los dos electrones) o bien por un trazo. Notar que el recuento de electrones distribuidos coincide con los disponibles y que el átomo central completa su octeto, así como los hidrógenos terminales adquieren el máximo número de electrones posibles (dos).

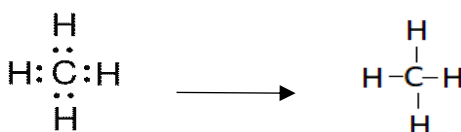


Figura 5.2. Estructura de Lewis del metano.

Estructura de Lewis del amoníaco, NH₃

En este caso, el nitrógeno (el átomo central de la estructura) pertenece al grupo VA (o grupo 15), por lo cual cuenta con cinco electrones de valencia que, sumados a los tres que provee el átomo de hidrógeno, son un total de 8 electrones (4 pares) disponibles para construir la estructura de Lewis. El nitrógeno se conecta con el hidrógeno a través de tres enlaces simples que insumen 6 electrones; los dos electrones restantes se colocarán como un par libre en el átomo de nitrógeno, lográndose así completar el octeto.

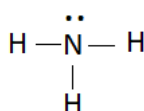


Figura 5.3. Estructura de Lewis del amoníaco.

Estructura de Lewis del monóxido de carbono, CO

El carbono tiene cuatro electrones de valencia y el oxígeno posee seis (pertenece al grupo VIA o 16 de la tabla periódica) por lo tanto, se dispone de 10 electrones. En la figura 5.4 (a) se presenta la estructura que surge de conectar los átomos a través de un enlace simple. De este modo, 2 electrones son utilizados en la formación del enlace, pudiendo ubicar, por ejemplo, 6 electrones alrededor del átomo de O (3 pares libres), completando su octeto. Los 2 electrones restantes fueron colocados sobre el átomo de C, quien queda rodeado de 4 electrones, no completando su octeto. Se procede entonces a formar un segundo enlace, distribuyendo 4 electrones, utilizando otros 4 (2 pares libres) para completar el octeto del O y ubicando los 2 restantes sobre el C, que, aun así, no completa su octeto (figura (b)). Para que el átomo de carbono tenga

8 electrones, necesitamos dibujar un tercer enlace (figura (c)). De este modo, quedan distribuidos 6 electrones enlazantes, se ubican 2 electrones (1 par libre) sobre el O, completando su octeto, y el par de electrones restantes sobre el C, quien también alcanza el octeto. Como vemos, la estructura de la molécula de monóxido de carbono posee un triple enlace y un par de electrones solitarios o libres en cada átomo como se muestra en la figura (c). La presencia del triple enlace concuerda con el hecho que el monóxido de carbono presenta el enlace más fuerte conocido (1076 kJ mol^{-1}) hasta el momento (McArdle, 2019).

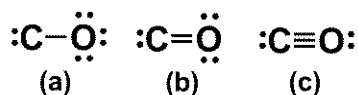


Figura 5.4. Construcción de la estructura de Lewis del monóxido de carbono.

Estructura de Lewis del ion nitrato, NO_3^-

El nitrógeno y el oxígeno pertenecen a los grupos VA (o 15) y VIA (o 16) de la tabla periódica, por lo cual aportan un total de 23 electrones de valencia. Debido a que se trata de un anión con una carga negativa, debemos sumar un electrón adicional, por lo cual, se cuenta con 24 electrones (12 pares) para construir la estructura de Lewis. En el caso de los iones, la estructura se colocará entre corchetes y la carga del ion se ubicará en la parte superior derecha del mismo, como se muestra en la figura 5.5. El nitrógeno (átomo central) se conecta con uno de los átomos de oxígeno a través de un doble enlace, lo que permite que complete el octeto. El doble enlace podría dibujarse con cualquiera de los átomos de oxígeno, originando tres posibles estructuras de Lewis que son equivalentes entre sí. Estas estructuras se denominan estructuras de resonancia, como discutiremos más adelante.

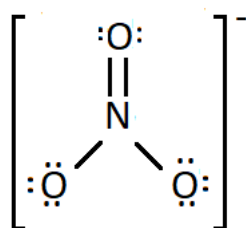


Figura 5.5. Estructura de Lewis del ion nitrato.

Estructura de Lewis del pentacloruro de fósforo, PCl_5

El fósforo pertenece al grupo VA (o 15) y el cloro pertenece al grupo VIIA (o 17) de la tabla periódica, por lo cual contamos con 40 electrones (20 pares) para construir la estructura de Lewis. Como se observa en la figura 5.6, cada uno de los átomos de cloro se conecta al átomo central con un enlace simple, con lo cual, el fósforo posee diez electrones, excediéndose el octeto. Los treinta electrones restantes se ubican como pares de electrones libres alrededor de los átomos de cloro, completando el octeto de cada uno de ellos.

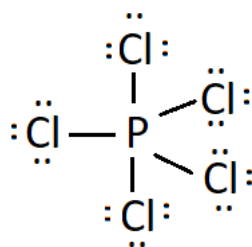


Figura 5.6. Estructura de Lewis del pentacloruro de fósforo.

Los elementos del segundo periodo de la tabla periódica sólo tienen orbitales de valencia $2s$ y $2p$ disponibles para formar enlaces. Puesto que estos orbitales pueden contener un máximo de ocho electrones ($ns^2 np^6$), nunca hay más de un octeto de electrones alrededor de elementos del segundo periodo. Sin embargo, los elementos del tercer periodo en adelante tienen orbitales ns , np y nd sin llenar, que pueden servir para formar enlaces y, por lo tanto, es común que excedan un octeto, utilizando sus orbitales d vacíos para alojar electrones adicionales. La figura 5.7 muestra algunas estructuras de especies químicas cuyo átomo central posee más de ocho electrones, tales como SF_4 , AsF_6^- , ICl_4^- y PO_4^{3-} .

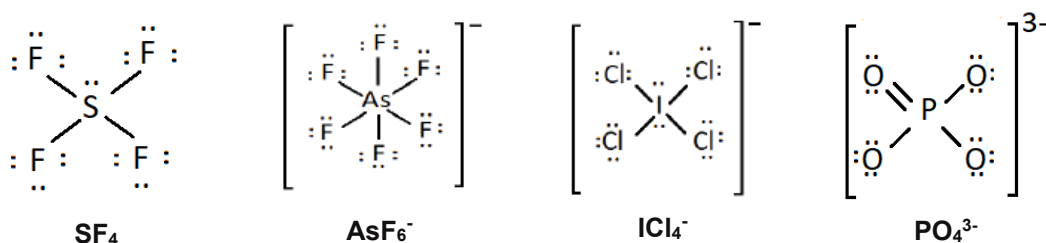


Figura 5.7. Estructuras de Lewis que son excepciones a la regla del octeto (octeto expandido).

Estructura de Lewis del cloruro de calcio, $CaCl_2$

El cloruro de calcio es un compuesto iónico, debido a la gran diferencia de electronegatividad entre el cloro y el calcio. Los electrones del enlace iónico son fuertemente atraídos por el cloro, que adquiere carga negativa (ion cloruro Cl^-) y, por lo tanto, el átomo de calcio se convertirá en un catión, Ca^{2+} . En estos casos no utilizamos un segmento para indicar el enlace iónico. Para dibujar este tipo de compuestos se requerirá:

- i) Representar el catión mediante la eliminación de los puntos del símbolo metálico.
- ii) Representar el anión mediante la transferencia de estos puntos al símbolo del átomo no metálico para completar el octeto.
- iii) Ajustar el número de átomos de cada tipo para que todos los puntos eliminados de los símbolos de los átomos metálicos se ubiquen en los del átomo no metálico.

En la figura 5.8 se muestran dos representaciones posibles de la estructura de Lewis de un compuesto iónico.



Figura 5.8. Estructuras de Lewis del cloruro de calcio CaCl_2 (compuesto iónico).

Carga formal y estado de oxidación

La **carga formal** de un átomo es igual al número de electrones de valencia que tiene el átomo libre (de acuerdo con el grupo de la tabla periódica al que pertenece), menos el número de electrones asignados al átomo en la estructura de Lewis. El número de electrones asignados a un átomo, según la estructura de Lewis, es la totalidad de los electrones no compartidos (pares libres) y la mitad de los electrones compartidos (se considera un electrón para cada uno de los átomos que forman el enlace). Así, la carga formal se puede calcular del siguiente modo:

$$\text{carga formal} = \text{número de electrones de valencia} - \text{número de electrones libres} - \frac{1}{2}(\text{electrones enlazados})$$

La carga formal permitirá establecer la estructura de Lewis más adecuada cuando es posible dibujar una molécula o ion con varias estructuras distintas que cumplen con la distribución del número total de electrones de valencia disponibles, según las condiciones que hemos visto. Las siguientes consideraciones permitirán elegir la mejor representación de la especie química:

- (i) Las estructuras que minimizan el número de cargas formales están favorecidas, esto es, se preferirán aquellas en las que los átomos tengan las cargas formales más cercanas a cero.
- (ii) Las estructuras con cargas formales negativas sobre los elementos electronegativos.
- (iii) Las estructuras con cargas del mismo signo en átomos adyacentes están desfavorecidas.
- (vi) Es importante tener en cuenta que la sumatoria de las cargas formales de todos los átomos de una molécula es cero y en el caso de un ion, será igual a la carga del mismo.

La figura 5.9 muestra las dos estructuras posibles del dióxido de carbono, CO_2 , y las cargas formales (CF) se indican arriba de los átomos.



Figura 5.9. Estructura del dióxido de carbono y cargas formales de los átomos.

La CF de los átomos de oxígeno de la estructura **(a)** resulta de la ecuación: $6 - 4 - 1/2(4)$ por lo cual, es nula. Asimismo, el átomo de carbono, cuya CF se calcula como: $4 - 0 - 1/2(4)$, también es cero. Sin embargo, en la estructura **(b)** se observa que la CF de los átomos de oxígeno es

diferente y, más aún, se asigna a uno de ellos una carga unitaria positiva, lo que resulta improbable dado el carácter electronegativo de ese elemento. Así, la CF del átomo de oxígeno que se encuentra a la izquierda del carbono resulta: $6 - 2 - (1/2)6 = +1$. Mientras que la CF del otro átomo de oxígeno es: $6 - 6 - (1/2)2 = -1$. La estructura más probable del dióxido de carbono es la **(a)** ya que posee las cargas formales más bajas posibles.

Para calcular el número (o estado) de oxidación de un átomo en una molécula a partir de la estructura de Lewis, nuevamente debemos hacer la diferencia entre los electrones de valencia y los electrones asignados de acuerdo a ésta. Como es de esperar, los electrones libres se asignan al átomo al que pertenecen. Sin embargo, a diferencia de la carga formal, para determinar el número de oxidación, los electrones del enlace se asignan al elemento más electronegativo (Parkin, 2006). Si el enlace es homonuclear, ambos átomos enlazados son idénticos, entonces, cada átomo recibirá un electrón. El número de oxidación se calcula según la siguiente ecuación:

$$\text{número (estado) de oxidación} = e^- \text{ valencia} - e^- \text{ asignados}$$

Es importante destacar que la valencia (el número de enlaces que puede formar un átomo) y el número de oxidación (carga asignada a un átomo que forma parte de un compuesto), no son lo mismo. Por ejemplo, la valencia del carbono central en el tetrametilmetano $\underline{\text{C}}(\text{CH}_3)_4$ es cuatro, pero el número de oxidación es cero porque todos los enlaces son homonucleares C-C.

Mientras que los conceptos de número de oxidación y carga formal están estrechamente relacionados, en el sentido de que ambos se refieren a la carga de un átomo en una molécula, tienen valores muy diferentes porque están determinados por dos formalismos distintos que exageran, respectivamente, el carácter iónico y el carácter covalente del enlace (Parkin, 2006).

Examinemos el número de oxidación del nitrógeno en el ion amonio, NH_4^+ , cuya estructura de Lewis se presenta en la figura 5.10. El nitrógeno pertenece al grupo VA (o 15), por lo que aporta cinco electrones de valencia; cada átomo de hidrógeno contribuye con un electrón de valencia (9 electrones en total). Debido a que se trata de un catión con carga +1, se resta una unidad del total de electrones aportados por los átomos, entonces la estructura se dibuja con 8 electrones totales. El nitrógeno es más electronegativo que el hidrógeno, por lo cual, todos los electrones de los enlaces (8) se le asignan a él. Entonces, la diferencia entre los electrones de valencia del nitrógeno y los 8 electrones enlazantes da como resultado que su número de oxidación es -3. Para cada hidrógeno, su número de oxidación es +1, ya que sólo se tiene en cuenta su electrón de valencia y no se le asigna ninguno de los enlazantes.

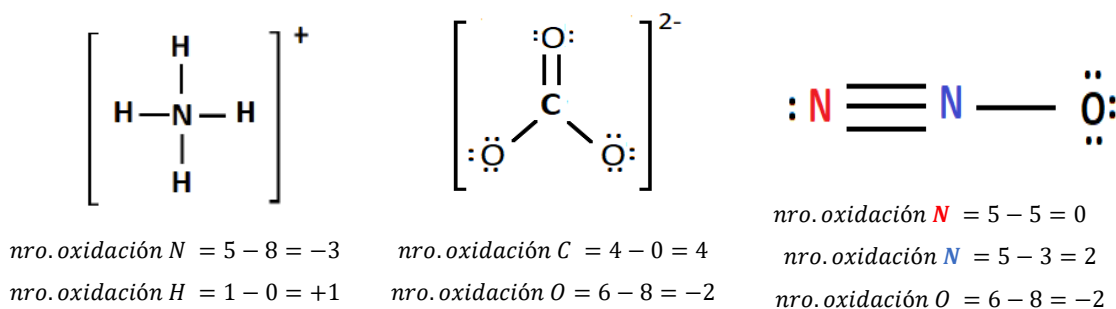


Figura 5.10. Estructuras de Lewis y estados de oxidación.

Es interesante discutir el caso del óxido nitroso, N_2O , donde se observa un triple enlace homonuclear entre los átomos de nitrógeno. El número de oxidación del nitrógeno terminal (coloreado en rojo en la figura 5.10) es nulo porque a los electrones de valencia del elemento se le restan los dos electrones libres y los tres electrones del enlace múltiple (la mitad de los electrones involucrados en el triple enlace). Sin embargo, el estado de oxidación del átomo de nitrógeno central (coloreado en azul en la figura 5.10) es +2, porque se obtiene de la diferencia entre los electrones de valencia y los tres electrones del enlace múltiple. El oxígeno es más electronegativo que el nitrógeno, por lo tanto, ambos electrones del enlace N-O se le asignan al átomo de oxígeno.

Estructuras de resonancia

Como discutimos anteriormente, existen especies químicas que no pueden representarse con una única estructura de Lewis. Cuando existen varias estructuras posibles con el mismo arreglo de átomos, pero diferente distribución de electrones, capaces de representar a una molécula o ion, decimos que hay **resonancia**. Tal es el caso de especies químicas que presentan enlaces múltiples que podrían ubicarse en diferentes posiciones, generando varias estructuras de Lewis con cargas formales iguales. Asimismo, las estructuras de resonancia se utilizan cuando una estructura de Lewis para una sola molécula no puede describir completamente el enlace que tiene lugar entre los átomos vecinos en relación con los datos empíricos para las longitudes de enlace reales entre esos átomos.

El ion nitrato, según su estructura de Lewis, tiene dos tipos de enlaces nitrógeno-oxígeno, un enlace doble y dos enlaces simples, como se observa en la figura 5.5, lo que sugeriría que un enlace nitrógeno-oxígeno es más corto y fuerte que cada uno de los otros dos. Además, esa estructura de Lewis implicaría, con respecto a la carga formal, que hay dos tipos de átomos de oxígeno en el ion nitrato, uno formalmente neutro y cada uno de los otros dos tiene una carga formal de -1. Experimentalmente, sin embargo, los tres enlaces nitrógeno-oxígeno en el ion nitrato tienen la misma longitud de enlace (1,258 Å), la misma energía de enlace, y los tres átomos de oxígeno son indistinguibles (Fugel y col., 2018). Es interesante destacar que la longitud del enlace entre nitrógeno y oxígeno es mayor que para un enlace doble típico $\text{N}=\text{O}$ (1,20 Å) y menor que la de un enlace simple $\text{N}-\text{O}$ (1,40

À). Por lo tanto, una única estructura de Lewis no explica satisfactoriamente la estructura y las uniones químicas del ion nitrato. En este sentido, se consideran tres estructuras de resonancia, como se presenta en la figura 5.11, denominadas *estructuras contribuyentes*. La combinación de ellas es un *híbrido de resonancia* de las estructuras de Lewis participantes.

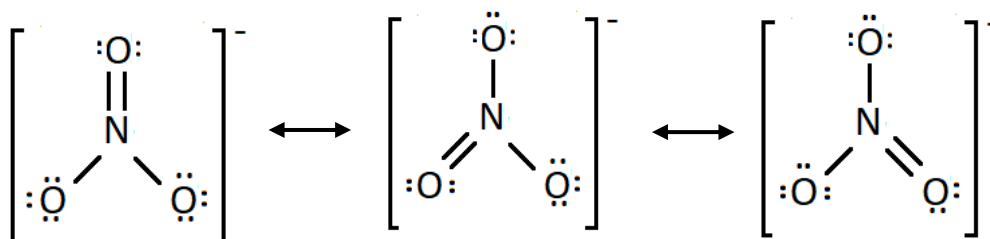


Figura 5.11. Estructuras de resonancia del anión nitrato.

Excepciones a la regla del octeto

Cuando se dibujaron las estructuras de Lewis del pentacloruro de fósforo, PCl_5 , el tetrafluoruro de azufre, SF_4 , el ion hexafluoruro de arsénico, AsF_6^- , el ion tetracloruro de yodo, ICl_4^- y el ion fosfato, PO_4^{3-} , se discutió la necesidad de rodear al átomo central con más de ocho electrones, lo que resulta en una excepción a la regla del octeto. Como ya se ha discutido, los elementos a partir del tercer período de la tabla periódica pueden expandir su octeto debido a que poseen orbitales *d* disponibles.

En contraste, hay algunos casos en los que el átomo central está rodeado por menos de ocho electrones y que, por lo tanto, también son excepciones a la regla del octeto. Este el caso de los compuestos que contienen berilio (Be), boro (B) y aluminio (Al). En la figura 5.12. se muestran las estructuras del fluoruro de berilio, BeF_2 , trifluoruro de boro, BF_3 , y tricloruro de aluminio, AlCl_3 . Estos compuestos presentan enlaces covalentes a pesar de la diferencia de electronegatividad de los elementos involucrados.

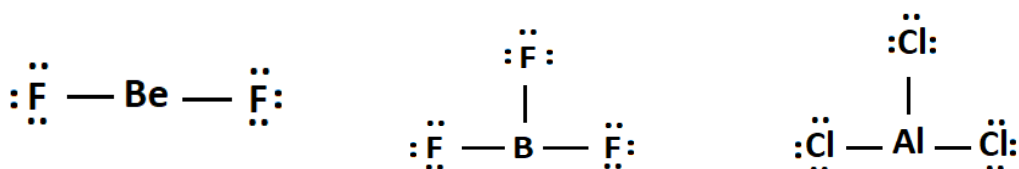


Figura 5.12. Estructuras de Lewis que son excepciones a la regla del octeto.

Asimismo, es posible encontrar moléculas con un número impar de electrones y, por lo tanto, alguno de sus átomos no podrá tener un octeto. Entre estas especies, denominadas *radicales*, podemos mencionar al monóxido de nitrógeno, NO (11 electrones), dióxido de nitrógeno, NO_2 (17 electrones) y el dióxido de cloro, ClO_2 (19 electrones). En la figura 5.13. se observan las estructuras de Lewis con un electrón desapareado ubicado en el no metal distinto de oxígeno. De esta forma, se logra que la carga formal sea nula para el NO y ClO_2 ; y que el oxígeno (más electronegativo) posea una carga negativa y el átomo de nitrógeno una carga unitaria positiva en la estructura del NO_2 .

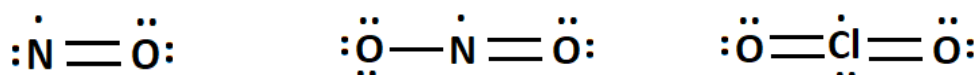


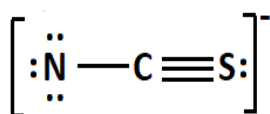
Figura 5.13. Estructuras de Lewis de moléculas con número impar de electrones.

A continuación, te preponemos algunos ejercicios donde podrás aplicar los conceptos estudiados.

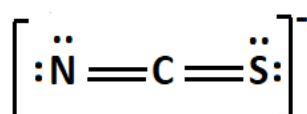
Ejercicio propuesto 5.1. Representá las estructuras de Lewis de los siguientes compuestos (el átomo central está subrayado): $\underline{\text{S}}\text{OCl}_2$, $\text{H}_3\underline{\text{P}}\text{O}_4$, $\underline{\text{S}}\text{O}_4^{2-}$, $\underline{\text{Xe}}\text{F}_4$, $\underline{\text{C}}\text{Cl}_2\text{O}$.

Calculá la carga formal de cada uno de los átomos y representá las estructuras resonantes, si corresponde.

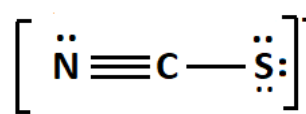
Ejercicio propuesto 5.2. Calculá la carga formal de los átomos y determiná cuál de las siguientes estructuras de Lewis propuestas para el ion tiocianato $\underline{\text{NCS}}^-$ es la más adecuada.



(a)

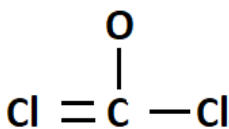


(b)

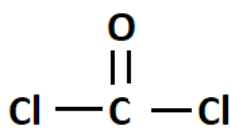


(c)

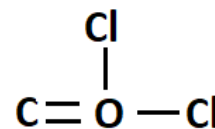
Ejercicio propuesto 5.3. Completá las estructuras siguientes con los pares libres que falten. Indicá cuál es la estructura más estable mediante el criterio de cargas formales.



(a)



(b)



(c)

Geometría molecular

En el apartado anterior hemos visto que las estructuras de Lewis nos permiten observar el arreglo de los átomos que componen una especie química (molécula o ion), los enlaces covalentes presentes y los pares de electrones libres, si los hubiera, alrededor del átomo central. Sin embargo, estas estructuras por sí mismas, no nos dan información sobre la **geometría molecular**, esto es, sobre la forma tridimensional de las moléculas o iones. La geometría molecular estará definida por la longitud y los ángulos de enlace. La forma y el tamaño de las moléculas, su polaridad y la fuerza de sus enlaces son de gran importancia en química, ya que determinan las

propiedades fisicoquímicas de las sustancias. Como vimos en el texto introductorio, aún pequeñas diferencias en estas propiedades pueden conducir a reacciones químicas y bioquímicas marcadamente distintas, como ocurre por ejemplo en el caso de los fármacos.

¿Cómo podemos predecir la forma de las moléculas o iones poliatómicos (formados por más de dos átomos)? Para determinar la geometría molecular haremos uso de las estructuras de Lewis y de un modelo denominado **modelo de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV)**. Los electrones de valencia de los átomos que componen una especie química formarán parte de enlaces covalentes (simples, dobles o triples) o permanecerán como pares libres alrededor de estos, constituyendo regiones de alta densidad electrónica. Para estudiar la forma de las moléculas e iones nos abocaremos a especies químicas que tienen un solo átomo central, que será un elemento representativo (del bloque *p* de la tabla periódica). Si enfocamos nuestra atención en el átomo central de una molécula o ion poliatómico, el modelo RPECV considera que las regiones de alta densidad electrónica alrededor de éste, con cargas negativas que se repelen entre sí, se distribuirán de manera de minimizar esas repulsiones. Es importante destacar que, para este modelo, un enlace simple o múltiple constituye una única zona de densidad electrónica, no haciendo distinción entre ellos.

En la figura 5.14 se muestra la forma en que pueden distribuirse las zonas de alta densidad electrónica, alrededor del átomo central, de manera de minimizar las repulsiones. En este punto haremos la suposición de que no hay diferencias en la intensidad de las repulsiones entre las regiones electrónicas, lo que conduce a formas simétricas, con ángulos como los mostrados en la figura. Estas distribuciones nos permiten predecir lo que denominaremos geometría de las densidades electrónicas, o simplemente **geometría electrónica**.

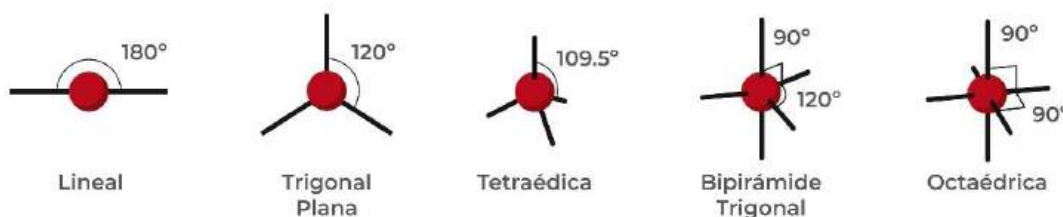


Figura 5.14. Geometría electrónica para 2, 3, 4, 5 y 6 regiones de alta densidad electrónica, de izquierda a derecha, respectivamente.

Como hemos estudiado, los enlaces covalentes están formados por pares de electrones a los que se denomina **pares enlazantes**, que están localizados entre los átomos que forman el enlace y atraídos por estos. El átomo central puede, además, tener a su alrededor pares de electrones libres, que no forman parte de un enlace, denominados **pares no enlazantes**. Los pares de electrones no enlazantes, que solo son atraídos por el átomo que los contiene, constituyen regiones de densidad electrónica que se extienden en el espacio más que la de los pares enlazantes, ejerciendo mayores repulsiones sobre las densidades electrónicas vecinas. De este modo, el modelo RPECV considera que las repulsiones entre pares libres son mayores que entre un par libre y uno enlazante, y estas a su vez mayores que entre pares enlazantes: par libre-par libre > par libre-par enlazante > par enlazante-par enlazante. Estas diferencias en las repulsiones entre zonas de alta densidad electrónica que no son idénticas pueden provocar cierta distorsión

de la geometría y en los ángulos indicados en la figura 5.14. Los enlaces múltiples, si bien constituyen una única región electrónica para el modelo de RPECV, poseen mayor densidad de carga que los enlaces simples y pueden provocar fuerzas de repulsión más intensas con los pares de electrones vecinos, conduciendo también a distorsiones respecto de las geometrías ideales.

Tal como hemos visto, tanto los pares de electrones enlazantes como los no enlazantes contribuyen a la geometría electrónica, y nos servirán de punto de partida para predecir la geometría molecular. *La geometría molecular es la distribución de átomos en el espacio y está determinada solo por los pares de enlace.* Así, aunque los pares libres tienen influencia en el arreglo tridimensional de la molécula, no forman parte de la geometría molecular. *Por lo tanto, siempre que una molécula posea pares libres alrededor del átomo central, sus geometrías electrónica y molecular no coincidirán.* Para aquellas moléculas que no tienen pares libres alrededor del átomo central, ambos arreglos geométricos, electrónico y molecular, son concordantes.

Para predecir la geometría de una molécula o ion poliatómico podemos seguir los siguientes pasos:

Paso 1: dibujar la estructura de Lewis de la especie cuya geometría se quiere predecir.

Paso 2: contar el número total de densidades electrónicas alrededor del átomo central: enlaces (simples, dobles, triples, sin distinción) y pares de electrones libres.

Paso 3: determinar la geometría de densidades electrónicas teniendo en cuenta la posición que adoptan, de modo de minimizar repulsiones. La figura 5.14 puede ayudarte a visualizar las formas ideales que adoptan en tres dimensiones.

Paso 4: determinar la geometría molecular, esto es, el arreglo tridimensional de los átomos enlazados.

Tomemos como ejemplo la predicción de la geometría molecular del amoníaco. En la sección anterior vimos que la estructura de Lewis para NH_3 es la que se muestra a la izquierda de la figura 5.15. El N es el átomo central y la estructura de Lewis cuenta con tres enlaces covalentes simples N-H y un par libre sobre el átomo de N. De este modo, hay 4 regiones de alta densidad electrónica alrededor del átomo central (3 enlaces + 1 par libre). En la figura 5.15 observamos que la geometría electrónica será tetraédrica, que es el modo de minimizar las repulsiones entre 4 densidades electrónicas. Este tetraedro estará deformado, debido a la mayor repulsión entre el par libre sobre el N y los enlaces adyacentes, que entre los pares enlazantes (el ángulo de enlace para NH_3 es de 107° , en lugar de $109,5^\circ$, característico de un tetraedro regular). Por último, nos queda determinar la **geometría molecular**, para ello sólo tendremos en cuenta los átomos enlazados, que forman un arreglo tridimensional denominado **piramidal trigonal**.

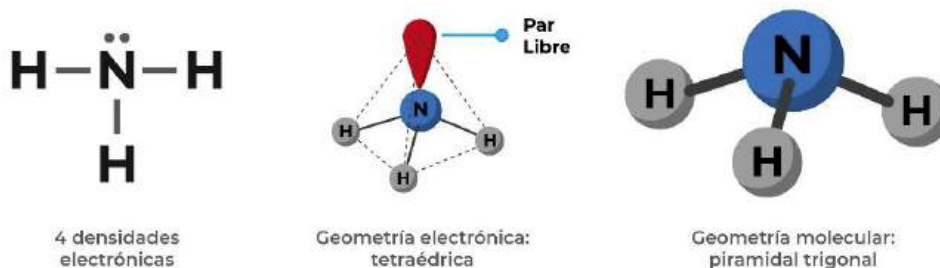




















Figura 5.15. Predicción de la geometría molecular para NH_3 .

A modo de resumen, en la tabla 5.1 se ilustran las geometrías electrónica y molecular de especies químicas sencillas, que poseen un átomo central y dos o más átomos terminales iguales. Las geometrías que poseen hasta 4 densidades electrónicas alrededor del átomo central incluyen todas las formas que se observan generalmente para moléculas o iones que cumplen

Tabla 5.1. Estructura electrónica y molecular.

N° Dens. Elect	Geometría electrónica	Pares enlazantes	Pares libres	Geometría molecular	Ejemplo		
2	 Lineal	2	0	 Lineal	CO ₂		
3	 Trigonal plana	3	0	 Trigonal plana	BF ₃		
				2	1	 Angular	NO ₂ ⁻
4	 Tetraédrica	4	0	 Tetraédrica	CH ₄		
				3	1	 Pirámide trigonal	NH ₃
				2	2	 Angular	H ₂ O
5	 Bipirámide trigonal	5	0	 Bipirámide trigonal	PCl ₅		
				4	1	 Balancín	SF ₄
				3	2	 Forma de T	ClF ₃
				2	3	 Lineal	XeF ₂
6	 Octaédrica	6	0	 Octaédrica	SF ₆		
				5	1	 Pirámide cuadrada	BrF ₅
				4	2	 Cuadrada plana	XeF ₄

la regla del octeto. Como hemos mencionado, si el átomo central pertenece al tercer periodo de la tabla periódica en adelante, puede expandir el octeto. En la tabla 5.1 se muestran las posibles geometrías para el caso de 5 y 6 densidades electrónicas alrededor del átomo central.

Ejercicio tipo 5.1. En base al modelo de RPECV, predice la geometría electrónica y molecular de XeF_4 .

Resolución.

El primer paso para predecir la geometría electrónica y molecular es determinar la estructura de Lewis de la molécula. En este caso, el átomo central es el Xe que tiene a su alrededor 4 enlaces simples Xe-F y 2 pares libres, esto es, un total de 6 densidades electrónicas y, por lo tanto, la **geometría electrónica es octaédrica**.

Para predecir la geometría molecular debemos ubicar las densidades electrónicas de manera de minimizar las repulsiones. Hemos visto que las repulsiones entre pares libres son las más intensas, entonces los ubicaremos lo más alejados posible. En un octaedro los seis vértices son equivalentes y los ángulos son de 90° . De este modo, si el átomo central tuviera sólo 1 par libre, sería indistinto posicionarlo en cualquiera de los vértices, generando una geometría piramidal cuadrada. Sin embargo, para XeF_4 , el Xe posee dos pares no enlazantes que deben ubicarse en lados opuestos del octaedro para minimizar las repulsiones. De este modo, la **geometría molecular** (formada sólo por los átomos enlazados) **es cuadrada plana** (ver tabla 5.1).

Ejercicio propuesto 5.4. En base al modelo de RPECV, predice las geometrías electrónica y molecular de BF_3 , PH_3 , SF_4 , XeF_2 , PF_5 y BrF_5 .

Te invitamos a explorar la siguiente simulación acerca de geometrías electrónicas y moleculares, que puede ser de utilidad para la visualización de las formas tridimensionales de las moléculas https://phet.colorado.edu/sims/html/molecule-shapes/latest/molecule-shapes_es.html

Utilizando la simulación, corroborá tus predicciones.

Polaridad de las moléculas

Por último, analizaremos brevemente cómo influye la geometría en la polaridad de las moléculas. Hemos estudiado que la polaridad de un enlace, que depende de la electronegatividad de los átomos que lo forman, nos da una idea de cuán equitativamente se comparten los electrones en esa unión. Así, moléculas formadas por dos átomos iguales (H_2 , O_2 , N_2 , etc.) no presentan momentos dipolares permanentes, es decir son **no polares**. Si los átomos que conforman las moléculas son distintos, la polaridad del enlace aumentará a medida que sea mayor la diferencia de electronegatividad entre los átomos, y las moléculas serán **polares** (CO , NO , etc.).

En el caso de moléculas formadas por más de dos átomos, deberemos tener en cuenta, no solo la polaridad de los enlaces, sino también la geometría molecular. Para comprender mejor la polaridad de moléculas poliatómicas tomemos el ejemplo de SF_6 . De acuerdo con su estructura de Lewis, el átomo central, S, está rodeado de 6 densidades electrónicas determinadas por los

pares de electrones de los enlaces S-F, en una distribución octaédrica. Debido a que el átomo central no posee pares de electrones libres, la geometría molecular coincide con la electrónica, siendo la molécula octaédrica. Cada uno de los enlaces S-F es polar (la electronegatividad del F es mayor a la del S); sin embargo, la molécula en su totalidad es **no polar por ser simétrica**. Recordemos que el momento dipolar es una magnitud vectorial. Si analizamos la molécula octaédrica de SF₆, podemos observar que los vectores momento dipolar de lados opuestos del octaedro se cancelarán. Por lo tanto, el momento dipolar de la molécula es cero, siendo no polar. ¿Qué ocurriría con la polaridad de la molécula si un átomo de F es reemplazado, por ejemplo, por Cl? En este caso, la especie será SCIF₅. La sustitución de un átomo de F por uno de Cl hace que la molécula pierda su simetría, obteniéndose una distribución asimétrica de carga electrónica que origina un momento dipolar permanente, con lo cual resulta una molécula polar.

Ejercicio tipo 5.2. Indicá si las siguientes moléculas son polares o no polares: NH₃, CCl₄, CHCl₃.

Resolución.

Para analizar la polaridad de las moléculas tenemos que determinar en primer lugar su geometría. Ya hemos visto que la geometría molecular del **NH₃** es piramidal trigonal (figura 5.15), con un par de electrones libres sobre el N. Podemos concluir entonces que la molécula, que no es simétrica, posee una distribución asimétrica de electrones y por lo tanto es **polar**.

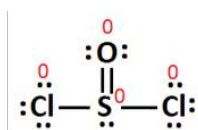
Para el caso del **CCl₄**, la estructura de Lewis nos indica que el átomo central (C), forma parte de 4 enlaces C-Cl y no posee pares de electrones libres. La geometría electrónica coincide con la molecular y es tetraédrica. Debido a que la molécula de CCl₄ es simétrica, si descomponemos los vectores momento dipolar de los enlaces C-Cl en las tres dimensiones, observaremos que se cancelan entre sí, siendo la molécula **no polar**.

Para analizar la polaridad de **CHCl₃** podemos usar la estrategia de pensar que, si en la molécula CCl₄ se reemplaza un átomo de Cl por uno de H, la especie deja de ser simétrica y, por lo tanto, tendrá un momento dipolar permanente y será **polar**.

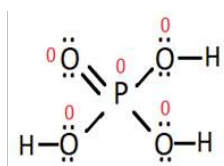
Ejercicio propuesto 5.5. Analizá la polaridad de las siguientes moléculas BF₃, PH₃, SF₄, XeF₂, PF₅ y BrF₅, cuyas geometrías determinaste en el ejercicio propuesto 5.4.

Respuestas de los ejercicios propuestos

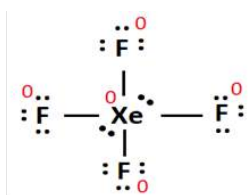
Ejercicio propuesto 5.1. La carga formal de los átomos se indica en color rojo.



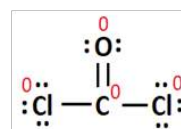
Cl₂SO



H₃PO₄

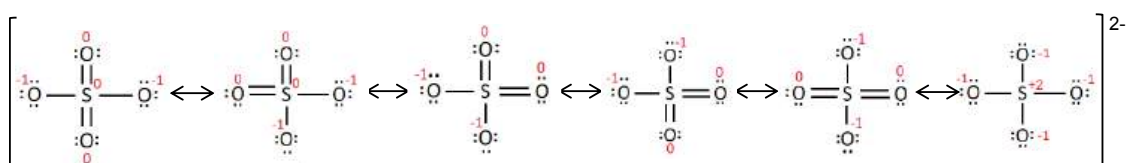


XeF₄

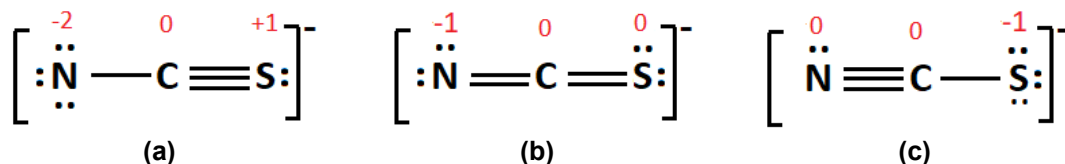


CCl₂O

El ion sulfato presenta seis estructuras de resonancia.

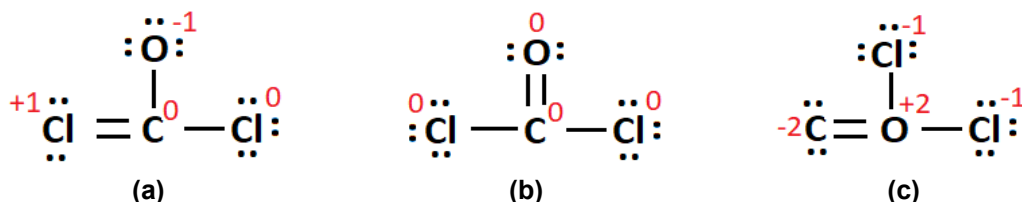


Ejercicio propuesto 5.2. La carga formal de los átomos se indica en color rojo.



La estructura más probable del ion tiocianato es la (b) porque las cargas formales son las más cercanas a cero y la carga negativa recae sobre el elemento más electronegativo (electronegatividades: N = 3; C = 2,6; S = 2,6).

Ejercicio propuesto 5.3. La estructura más probable es la (b).



Ejercicio propuesto 5.4. BF_3 , trigonal plana; PH_3 , piramidal trigonal; SF_4 , balancín; XeF_2 , lineal; PF_5 , bipirámide trigonal y BrF_5 , pirámide cuadrada.

Ejercicio propuesto 5.5. BF_3 (no polar); PH_3 (polar), SF_4 (polar), XeF_2 (no polar), PF_5 (no polar) y BrF_5 (polar).

Referencias

- DeKock, R. L. (1987). The chemical bond. *Journal of Chemical Education* 64(11), 934-941.
- Evans, A. M. (2001). Comparative Pharmacology of S-(+)-Ibuprofen and (RS)-Ibuprofen. *Clinical Rheumatology* 20 Suppl 1: S9-14.
- Fugel, M., Kleemiss, F., Malaspina, L. A., Pal, R., Spackman, P. R., Jayatilaka, D., Grabowsky, S. (2018). Investigating the resonance in nitric acid and nitrate ion based on modern bonding analysis. *Australian Journal of Chemistry*, 71, 227-237.
- Gillespie, R. J. (2001). Electron densities, atomic charges, and ionic, covalent, and polar bonds. *Journal of Chemical Education* 78(12), 1688-1691.

- Lewis, G. N. (1916). The atom and the molecule. *Journal of the American Chemical Society* 38(4), 762-785.
- McArdle, P. (2019). Systematic procedure for drawing Lewis structures based on electron pairing priority and the explicit use of donor bonds: An alternative to the normal procedure which can be pen and paper based or automated on a PC in user interactive 3D. *Journal of Chemical Education* 96(7), 1412-1417.
- Medina-Franco, J. L., Eli Fernández-de Gortaria, E., Jesús Naveja, J. (2015). Avances en el diseño de fármacos asistido por computadora. *Educación Química* 26, 180-186.
- Parkin, G. (2006). Valence, oxidation state, and formal charge: Three related and fundamentally different concept. *Journal of Chemical Education* 83(5), 791-799.
- PhEt Interactive simulation. University of Colorado Boulder(2021).
https://phet.colorado.edu/sims/html/molecule-shapes/latest/molecule-shapes_es.html

CAPÍTULO 6

Estequiometría: relaciones cuantitativas entre reactivos y productos en una reacción química

Facundo Barraqué y Virginia Vetere

En este capítulo estudiaremos un tema central de gran aplicación en diferentes ámbitos, como la industria, distintas disciplinas científicas y la vida cotidiana. Conocer y distinguir la naturaleza de los procesos físicos y químicos, estudiar las características de las reacciones químicas, representarlas simbólicamente y establecer relaciones cuantitativas entre las sustancias que intervienen en ellas, forman parte de los objetivos de este apartado.

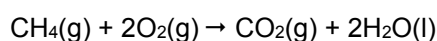
Lectura inicial

La naturaleza de los procesos químicos

Cotidianamente somos espectadores de fenómenos y procesos de la naturaleza que despiertan nuestra curiosidad y suscitan preguntas. Basta con contemplar la lluvia para intuir que en la atmósfera se produjo un cambio en la materia. La síntesis de proteínas o la obtención de energía mediante los alimentos que ingerimos con la dieta forman parte de un sinnúmero de reacciones que están continuamente ocurriendo en nuestro cuerpo (Lehninger y col., 2005). Existen muchos otros procesos, que se producen por la intervención de los humanos y que también son muy importantes para nuestra vida y el desarrollo de la sociedad. En definitiva, muchos de los sucesos que experimentamos en lo cotidiano son consecuencia de algún proceso químico o físico particular. Es importante diferenciar las características asociadas a las transformaciones físicas y a las químicas, estudiadas en el capítulo 2.

Como hemos visto, en los procesos físicos no hay cambios en la composición de la materia. Por ejemplo, la modificación del estado de agregación de una sustancia no involucra la ruptura de enlaces químicos. La solidificación del agua en nuestros congeladores o la sublimación de la naftalina que se utiliza para proteger la ropa de las polillas, son ejemplos de transformaciones físicas. La composición química de estas sustancias, agua o naftalina, es la misma en cualquiera de sus estados de agregación.

Por otro lado, los procesos químicos, de los que nos ocuparemos en este capítulo, involucran la transformación de la materia a través del reacomodamiento de los átomos que la constituyen. Por ejemplo, en la combustión del metano, componente principal del gas natural, empleada entre otras cosas para calefaccionar los ambientes, se produce una reacción química entre este gas y el oxígeno del aire, para producir dióxido de carbono, gaseoso, y agua líquida. En este tipo de procesos las sustancias de partida (metano y oxígeno), a las que denominaremos **reactivos**, se combinan, rompiendo sus enlaces y generando otros, para dar lugar a nuevas sustancias llamadas **productos** (dióxido de carbono y agua). Estas transformaciones pueden simbolizarse a través de lo que se denominan **ecuaciones químicas**, que son una forma simple y sintética de representar los procesos químicos. Por ejemplo, la ecuación química que representa la combustión completa del metano es:



Todas las reacciones químicas deben cumplir con un principio fundamental, la **ley de conservación de la masa**, descubierta por el científico francés Antoine-Laurent de Lavoisier, de quien hemos hablado en el capítulo 1. En 1789, Lavoisier expresó en su libro Tratado Elemental de Química: “Podemos asentar como axioma incontrovertible que, en todas las operaciones del arte y la naturaleza, nada se crea; existe una cantidad igual de materia tanto antes como después del experimento”. De este modo, la masa total de las sustancias presentes antes de que una reacción química ocurra debe ser igual a la masa total de las sustancias que se encuentran al final del proceso. Esto se ve reflejado en la ecuación química que representa la combustión del metano, donde podemos observar que el número de átomos de cada elemento antes y después de la reacción es el mismo. Durante una reacción química, los átomos no se crean ni se destruyen, sino que se reordenan para dar lugar a la formación de productos. Las relaciones cuantitativas entre las sustancias que forman parte de un proceso químico se estudian en el marco de lo que se denomina **estequiometría**.

Reacciones químicas

Como vimos en el capítulo 2, durante un **proceso físico** no hay cambio en la identidad de las sustancias intervinientes. La fusión del agua es un ejemplo de proceso físico: antes y después del cambio de agregación, la sustancia sigue siendo la misma, H₂O. Por el contrario, en un **proceso químico** se producen cambios en la composición de las sustancias que forman parte de él. La oxidación de un clavo de hierro expuesto al aire y a la humedad, es un ejemplo de proceso químico. Inicialmente las sustancias intervinientes son Fe y O₂, que, al ocurrir la oxidación se transforman en Fe₂O₃, compuesto de color rojizo característico que recubre las piezas de hierro a las que comúnmente denominamos oxidadas.

Una **reacción química** es el proceso durante el cual una o más sustancias se transforman en otras diferentes, como ocurre con la oxidación del hierro. Durante estos procesos, la naturaleza de los átomos no se modifica (un elemento no se transforma en otro elemento), lo que ocurre es una redistribución de estos por ruptura y formación de nuevos enlaces.

Una forma sencilla de representar una reacción química, que contenga toda la información cuantitativa y cualitativa de la transformación, es a través de la denominada **ecuación química**. La construcción de una ecuación química debe seguir ciertas reglas para que realmente sea una representación de un proceso químico determinado.

En primer lugar, distinguiremos la o las sustancias de partida, a las que llamamos **reactivos**, de la o las sustancias que se producen en la reacción química, que denominamos **productos**. En nuestro ejemplo, el hierro (Fe) y el oxígeno (O₂) son los reactivos, y el óxido de hierro (III) (Fe₂O₃) el producto. Para escribir una reacción química, los reactivos se colocan a la izquierda, separados por una coma (→), de los productos que se indican a la derecha. Si existe más de un reactivo, estos se organizan colocando entre ellos un signo de adición (+), que indica que reaccionan entre sí. En la figura 6.1 se muestra la ecuación química que representa la oxidación del hierro cuando reacciona con el oxígeno presente en el aire. La flecha, apuntando en una única dirección, de reactivos hacia productos, indica que la reacción es completa, es decir, que ocurre hasta consumir completamente uno o más reactivos. Es importante remarcar que, muchas reacciones químicas no se completan, sino que llegan a un estado en el que están presentes tanto reactivos como productos, denominado *equilibrio químico*, concepto que excede el alcance de este libro.

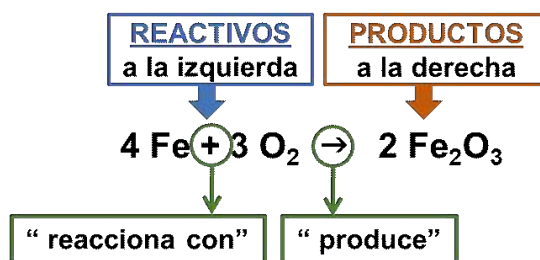
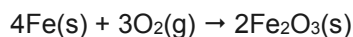


Figura 6.1. Ecuación química que representa la oxidación del hierro en contacto con la atmósfera.

Las reacciones químicas se basan en la **ley de conservación de la masa**, que establece que *la masa total de todas las sustancias presentes antes de una reacción química es la misma que la masa total después de la reacción*. De este modo, el número de átomos de cada elemento a cada lado de la flecha que separa reactivos y productos debe ser el mismo. Para cumplir con esta premisa, se procede al **ajuste** o **balanceo** de la ecuación química. Esta operación puede realizarse por "prueba y error" o utilizando un método sistemático, como veremos en el capítulo 8 para algunas reacciones de oxidación-reducción.

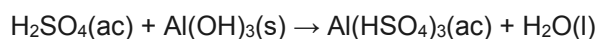
Es muy importante tener en cuenta que, *durante el proceso de balanceo no se puede modificar ninguna fórmula química* mediante reemplazo de los elementos o los subíndices, ya que esto implicaría cambiar las sustancias involucradas en la reacción química. El único modo de balan-

cear una ecuación, sin alterar la descripción cualitativa de la reacción química, es agregar *números que afecten a toda la fórmula química* en conjunto. Esto se logra mediante coeficientes que multiplican a la fórmula completa de un compuesto, denominados **coeficientes estequiométricos**. En la figura 6.1 pueden observarse los coeficientes estequiométricos 4, 3 y 2, para Fe, O₂ y Fe₂O₃, respectivamente. La información brindada por la ecuación química puede completarse indicando el estado físico de las sustancias intervinientes, a continuación de la fórmula. De este modo, la ecuación química que representa, cualitativa y cuantitativamente, la oxidación del hierro por el oxígeno, para producir óxido de hierro (III) queda expresada:



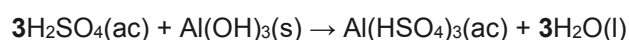
Quizás habrás notado que existen otras combinaciones de coeficientes estequiométricos que mantienen las proporciones de reactivos y productos necesarias para cumplir con la conservación de la masa antes y después de la reacción. Por ejemplo, podemos plantear las ecuaciones: $8\text{Fe(s)} + 6\text{O}_2\text{(g)} \rightarrow 4\text{Fe}_2\text{O}_3\text{(s)}$ o $40\text{Fe(s)} + 30\text{O}_2\text{(g)} \rightarrow 20\text{Fe}_2\text{O}_3\text{(s)}$. Si bien estos coeficientes satisfacen la ecuación, se opta por el conjunto de números más sencillo debido a que, a partir de ellos, se realizan generalmente cálculos estequiométricos.

Ejercicio tipo 6.1. Balanceá la siguiente ecuación:



Resolución

Resulta más sencillo comenzar el ajuste de una ecuación por aquellos elementos que aparecen el menor número de veces a ambos lados de la flecha. En este caso, sería engorroso balancear la ecuación si comenzamos por H u O; sin embargo, es más fácil iniciar con el Al o el S. Podemos observar que necesitamos 3 átomos de S para satisfacer la fórmula del producto hidrógeno sulfato de aluminio, Al(HSO₄)₃. Podemos entonces colocar el coeficiente estequiométrico de 3 delante del reactivo H₂SO₄. En cuanto al aluminio, hay un átomo de cada lado de la flecha, por tanto, la ecuación está balanceada respecto a este elemento. Nos resta entonces ajustar la ecuación respecto de H y O. Si contamos el número de átomos de estos elementos del lado de los reactivos, luego de agregar el coeficiente 3 al H₂SO₄, observamos 9 átomos de H y 15 de O, mientras que, del lado de los productos, tenemos 5 átomos de H y 13 de O. Si del lado de los productos se agregan 4 átomos de H y 2 de O colocando el coeficiente estequiométrico de 3 delante de la molécula de agua la ecuación balanceada resulta:



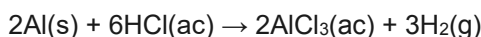
Ejercicio propuesto 6.1. Balanceá las siguientes ecuaciones:

- $\text{NaOH(ac)} + \text{H}_2\text{SO}_4\text{(ac)} \rightarrow \text{Na}_2\text{SO}_4\text{(ac)} + \text{H}_2\text{O(l)}$
- $\text{NaHCO}_3\text{(ac)} \rightarrow \text{Na}_2\text{CO}_3\text{(ac)} + \text{H}_2\text{O(l)} + \text{CO}_2\text{(g)}$
- $\text{Li(s)} + \text{N}_2\text{(g)} \rightarrow \text{Li}_3\text{N(s)}$

Estequiometría

La estequiometría es el estudio de las relaciones cuantitativas asociadas a un proceso químico. Los cálculos estequiométricos nos permiten determinar, entre otras cosas, la cantidad de reactivos consumidos o la de productos formados. Las cantidades de reactivos y productos pueden expresarse en masa, en número o moles de átomos, moléculas, y iones, o en volúmenes.

Para visualizar el significado cuantitativo de una ecuación química, analizaremos el siguiente ejemplo:



Las relaciones entre las cantidades de reactivos y productos pueden analizarse desde un punto de vista atómico/molecular (considerando número de átomos y moléculas intervinientes, o sus masas), o desde un punto de vista molar (relacionando moles de átomos o moléculas o sus en masa). En la figura 6.2 se presentan estas relaciones.

Interpretación molecular						
2 Al	+	6 HCl	→	2 AlCl ₃	+	3 H ₂
2 átomos	y	6 moléculas	producen	2 moléculas	y	3 moléculas
2x27 uma	y	6x36,5 uma	producen	2x133,5 uma	y	3x2 uma

Interpretación molar						
2 Al	+	6 HCl	→	2 AlCl ₃	+	3 H ₂
2 moles	y	6 moles	producen	2 moles	y	3 moles
2x27 g	y	6x36,5 g	producen	2x133,5 g	y	3x2 g
2x6,022x10 ²³ átomos	y	6x6,022x10 ²³ moléculas	producen	2x6,022x10 ²³ moléculas	y	3x6,022x10 ²³ moléculas

3x22,4 L
(gas ideal, CNTP)

Figura 6.2. Significado cuantitativo de una ecuación química.

Es importante notar que, para el análisis molecular/atómico se deben utilizar las masas expresadas en uma, o su equivalente en gramos ($1 \text{ uma} = 1,66054 \times 10^{-24} \text{ g}$), que son masas extremadamente pequeñas, en concordancia con la escala de la materia que estamos analizando. Para el análisis molar, las masas en gramos son valores macroscópicos, que podemos pesar con facilidad en el laboratorio. Siempre que respetemos la escala, microscópica o macroscópica, con la que interpretamos las relaciones cuantitativas entre reactivos y productos, se pueden hacer combinaciones de la cantidad de sustancia en diferentes unidades. En el ejemplo de la figura 6.2 podemos decir que 2 moles de Al se combinan con 6 moles de HCl, o que 2 moles de Al se combinan con $6 \times 36,5 \text{ g}$ de HCl (219 g de HCl), de acuerdo con nuestra conveniencia a los fines de realizar un cálculo. De igual manera, a escala molecular, 2 átomos de Al producen 3 moléculas de H₂, que es equivalente a expresar que se forman 6 uma de H₂ ($9,96 \times 10^{-24} \text{ g H}_2$). En la figura

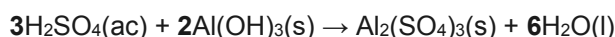
se ha agregado para el caso del gas hidrógeno, la cantidad de este producto en términos de volumen. Como veremos en el capítulo 9, un mol de cualquier gas, cuyo comportamiento se aproxima al de un *gas ideal*, en condiciones normales de temperatura y presión (CNPT, 0 °C y 1 atmósfera), ocupa un volumen de 22,4 litros.

Ejercicio tipo 6.2. El hidróxido de aluminio reacciona con el ácido sulfúrico para formar sulfato de aluminio y agua.

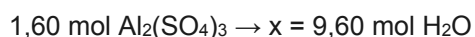
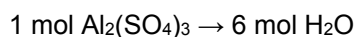
- Escribí la ecuación balanceada que interpreta esta reacción química.
- Calculá las moléculas de agua que se forman si se producen 1,60 moles de sulfato de aluminio.
- Calculá los gramos de ácido sulfúrico que se necesitan para neutralizar completamente 0,200 moles de hidróxido de aluminio.
- Calculá los gramos de hidróxido de aluminio necesarios para obtener 171 g de sulfato de aluminio.

Resolución

a) Para escribir la ecuación química balanceada debemos formular los productos y los reactivos, ubicarlos a izquierda y derecha de la flecha, respectivamente, y balancear la ecuación. Para el ajuste de la ecuación conviene comenzar con S y Al. Si observamos el producto, $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$, vemos que para contar con los 2 átomos de Al y los 3 átomos de S de su fórmula molecular, debemos agregar un coeficiente estequiométrico de **3** delante de H_2SO_4 y un coeficiente de **2** delante de $\text{Al}(\text{OH})_3$. Restan ajustar los átomos de H y O, lo que se consigue colocando un coeficiente estequiométrico de **6** delante de H_2O . La ecuación balanceada resulta:



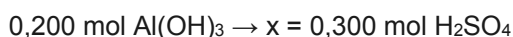
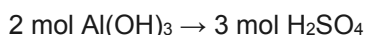
b) De la ecuación química observamos que por cada mol de sulfato de aluminio que se produce, también se obtienen 6 moles de moléculas de agua.



Para transformar moles de moléculas en número de moléculas debemos usar el número de Avogadro ($6,022 \times 10^{23}$).

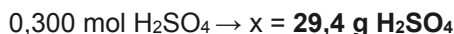
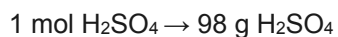


c) De la ecuación química se desprende que son necesarios 3 moles de ácido sulfúrico para neutralizar 2 moles de hidróxido de aluminio.

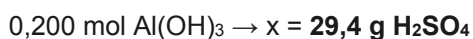
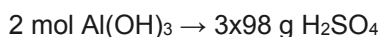


Sabemos que la masa de 1 mol de H_2SO_4 es de 98 g. Recordemos que la masa molecular relativa (MMR) del H_2SO_4 se calcula a partir de las masas atómicas relativas (MAR) de los elementos que la componen, datos que están disponibles en la tabla periódica. En este caso, las

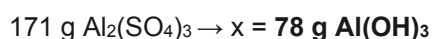
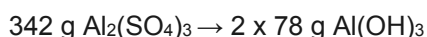
masas atómicas relativas son: $MAR(H) = 1$, $MAR(S) = 32$ y $MAR(O) = 16$. Entonces $MMR(H_2SO_4) = 2 \times 1 + 32 + 4 \times 16 = 98$, esto significa que la masa de 1 mol de H_2SO_4 es 98 g.



Tal vez habrás notado que, podemos arribar al mismo resultado en una única operación, relacionando directamente los moles de $Al(OH)_3$ con los gramos de H_2SO_4 , de acuerdo a la reacción química



d) A partir de la ecuación química se deduce que se necesitan 2 moles de $Al(OH)_3$ para obtener 1 mol de $Al_2(SO_4)_3$. Las masas moleculares relativas de estos compuestos son: $MMR(Al(OH)_3) = 78$ y $MMR(Al_2(SO_4)_3) = 342$; esto significa que 1 mol de $Al(OH)_3$ equivale a 78 g y 1 mol de $Al_2(SO_4)_3$ a 342 g. De este modo, podemos hacer el cálculo en una única operación.



Hay muchos modos de resolver los ejercicios de estequiometría, con mayor o menor número de operaciones algebraicas, partiendo desde diferentes datos, etc. Es importante que los abordes de la forma más adecuada a tu entendimiento.

Ejercicio propuesto 6.2. La reacción entre sulfuro de aluminio y agua produce hidróxido de aluminio y sulfuro de hidrógeno. a) Escribí la ecuación química balanceada para esta reacción. b) ¿Cuántos gramos de sulfuro de aluminio son necesarios para reaccionar con 3,50 g de agua? c) Calculá el número de moles de hidróxido de aluminio que se produce. d) ¿Cuántas moléculas de sulfuro de hidrógeno se forman?

Ejercicio propuesto 6.3. ¿Qué masa de Na_2CrO_4 se necesita para reaccionar exactamente con 5,00 g de $Pb(NO_3)_2$ y producir $PbCrO_4$ y $NaNO_3$? ¿Cuántos moles de $PbCrO_4$ se forman? ¿Qué masa de $NaNO_3$ se produce?

Reactivo limitante

Con mucha frecuencia, para realizar cálculos estequiométricos, tendremos los datos correspondientes a las cantidades disponibles de dos o más reactivos. Rara vez estas cantidades corresponden exactamente a la relación expresada en la ecuación química. Esto significa que, de alguno de los reactivos tendremos menos cantidad de la necesaria para respetar las proporciones estequiométricas.

Para entender este concepto, imaginemos que queremos preparar sándwiches de queso. Cada uno de ellos será elaborado con una feta de queso y un pan, que como es habitual en esta preparación, se cortará al medio. Si disponemos de 7 panes y 5 fetas de queso, ¿cuántos sándwiches podemos preparar?; ¿nos sobra queso? ¿cuánto?; ¿nos sobra pan? ¿cuánto? Seguramente, habrás arribado a la conclusión de que, podemos preparar 5 sándwiches, que usaremos la totalidad del queso y nos sobrarán dos panes. De este modo, el queso es lo que limitará nuestra producción de sándwiches. Cuando terminemos nuestra elaboración tendremos 5 sándwiches y dos panes que no se usaron.

De modo análogo, en una reacción química puede ocurrir que uno de los reactivos limite la cantidad de producto que se formará. Este reactivo, se denomina **reactivo limitante** y decimos que se encuentra **en defecto** respecto de los otros reactivos, que estarán en **exceso**. Así, al final de una reacción completa, junto con los productos, tendremos el exceso de los reactivos que quedaron sin reaccionar.

Para realizar cálculos estequiométricos debe tomarse como base la cantidad de reactivo limitante. Para determinar cuál es el reactivo que está en defecto es necesario comparar las cantidades de los reactivos disponibles con la relación que surge de la ecuación química balanceada. Para ejemplificar cómo podemos realizar estos cálculos analicemos paso a paso la siguiente situación:

Se desea calcular la masa de dióxido de nitrógeno formada cuando se mezclan 9,0 g de monóxido de nitrógeno con 6,4 g de oxígeno.

Paso 1: escribir la ecuación química balanceada: $2\text{NO}(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{NO}_2(\text{g})$

Paso 2: determinar el reactivo limitante. Para ello tenemos que comparar la información que nos da la ecuación química (relaciones estequiométricas) con las cantidades de reactivos de las que realmente disponemos (según los datos del ejercicio). Debido a que se informan las masas de los reactivos, haremos uso de las masas moleculares relativas que, expresadas en gramos nos dan la masa de un mol de cada sustancia. $\text{MMR}(\text{NO}) = 30$; $\text{MMR}(\text{O}_2) = 32$; $\text{MMR}(\text{NO}_2) = 46$. En la figura 6.3 se resume este análisis:

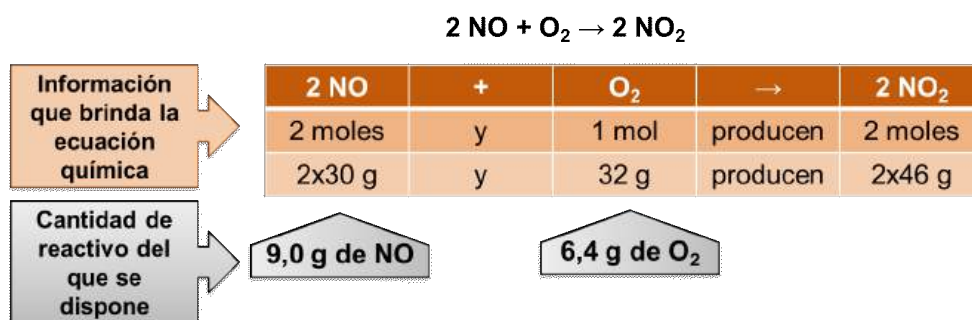
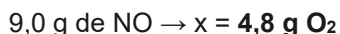


Figura 6.3. Comparación entre las cantidades estequiométricas y las disponibles para el ejemplo de la reacción entre NO y O₂ para producir NO₂.

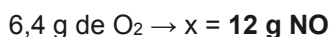
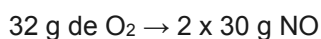
A partir de la información que nos brinda la ecuación química, sabemos que 2 x 30 g (2 moles) de NO reaccionan con 32 g (1 mol) de O₂. Sin embargo, de acuerdo con los datos del

ejercicio, se disponen de 9,0 g de NO, ¿qué masa de O₂ se requerirá para reaccionar con esa cantidad de NO?



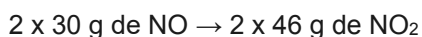
Este resultado nos indica que necesitaríamos 4,8 g de O₂ para que reaccione la totalidad del NO (9,0 g). Sin embargo, disponemos de 6,4 g de O₂, una cantidad mayor a la necesaria, por lo tanto, el O₂ es el reactivo que está en **exceso**. De este modo, el **reactivo limitante** es el **NO**, y realizaremos los cálculos de producto a obtener considerando la cantidad de NO con la que contamos. Al finalizar la reacción todo el NO reaccionará y quedará un exceso de O₂. Este exceso de O₂ será la diferencia entre la cantidad de oxígeno de la que se disponía y la necesaria para consumir todo el NO (cantidad de O₂ sin reaccionar = 6,4 g – 4,8 g = 1,6 g)

Podríamos haber arribado a la misma conclusión acerca del reactivo limitante, partiendo de la cantidad de O₂ disponible, esto es, determinar la masa de NO necesaria para que reaccione la totalidad del O₂ (6,4 g).



A partir de este cálculo, podemos concluir que son necesarios 12 g de NO para que reaccione todo el O₂ disponible. Sin embargo, sólo se dispone de 9,0 g de **NO**, por lo que este reactivo está en **defecto**. Así, el **NO** es el **reactivo limitante** y el O₂ el reactivo en exceso, tal como habíamos determinado anteriormente.

Paso 3: calcular la masa de producto formada a partir de la cantidad de reactivo limitante. La ecuación química indica que 2 x 30 g de NO (2 moles) producirán 2 x 46 g de NO₂ (2 moles). La cantidad de reactivo limitante disponible es 9,0 g, entonces:

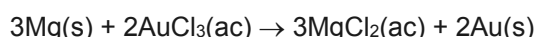


Ejercicio tipo 6.3. Se hacen reaccionar 1,00 g de magnesio con 3,00 g de cloruro de oro(III). Los productos obtenidos son cloruro de magnesio y oro.

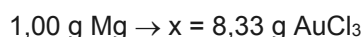
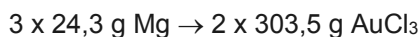
- Calculá la masa de oro que se obtiene.
- Calculá los moles de cloruro de magnesio que se obtienen.
- Calculá la masa del reactivo en exceso que quedó sin reaccionar.

Resolución

El primer paso en todo problema de estequiometría es escribir la ecuación química balanceada:

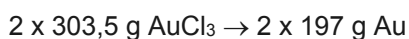


a) Para calcular la masa de producto obtenida (Au), debemos determinar cuál es el reactivo limitante. De la ecuación química observamos que 3 moles de Mg (3 x 24,3 g) reaccionan con 2 moles de AuCl₃ (2 x 303,5 g) (MAR(Mg) = 24,3; MMR(AuCl₃) = 303,5). Se dispone de 1,00 g de Mg, ¿qué masa de AuCl₃ se necesitará para que reaccione completamente esa cantidad de Mg?

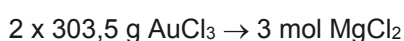


Este resultado indica que son necesarios 8,33 g de AuCl_3 para que reaccione completamente el Mg (1,00 g). Sin embargo, solo se dispone de 3,00 g de **AuCl_3** , siendo entonces éste el **reactivo limitante**. Así, el AuCl_3 se consume totalmente y al finalizar la reacción química se tendrán los productos (MgCl_2 y Au) y el reactivo en exceso que quedó sin reaccionar (Mg).

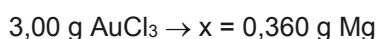
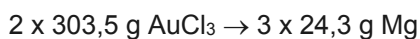
A partir de la masa de AuCl_3 calcularemos la de Au formada:



b) Los moles de MgCl_2 obtenidos también se calculan a partir del reactivo limitante:



c) Para calcular la masa del reactivo en exceso (Mg) que quedó sin reaccionar, debemos averiguar la masa de este reactivo que reaccionó con el AuCl_3 disponible.

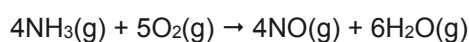


A partir de este cálculo determinamos que, del total de Mg disponible (1,00 g), reaccionaron con AuCl_3 0,360 g. Así, la cantidad de Mg sin reaccionar será la diferencia entre estas masas:

$$\text{Cantidad de Mg sin reaccionar} = 1,00 \text{ g} - 0,360 \text{ g} = \mathbf{0,64 \text{ g}}$$

Al finalizar la reacción quedan 0,64 g del reactivo en exceso sin reaccionar.

Ejercicio propuesto 6.4. La reacción entre amoníaco y oxígeno se representa por la siguiente ecuación:



Si se hacen reaccionar 0,130 moles de NH_3 con 4,20 g de O_2 . a) Determiná cuál es el reactivo limitante. b) ¿Cuántos moles de NO se forman? c) ¿Cuántos gramos del reactivo en exceso quedan sin reaccionar al finalizar la reacción?

Pureza de los reactivos

La sal de mesa es un sólido comúnmente utilizado en nuestra vida cotidiana. Si leemos con atención la etiqueta de este producto, que probablemente encontremos en nuestras casas, podemos observar que mayoritariamente está compuesta de cloruro de sodio (NaCl), pero también presenta pequeñas cantidades de iodato de potasio (KIO_3) y aglutinantes. A los fines culinarios, la composición de la sal de mesa no es un problema. Sin embargo, si necesitáramos NaCl para una reacción química a realizar en el laboratorio, y dispusiésemos únicamente de sal de mesa,

deberíamos decidir si la **pureza** de ese reactivo es adecuada, además de analizar si el resto de los componentes conducen a resultados no deseados al llevar a cabo la reacción.

La mayor parte de los reactivos que se emplean en el laboratorio no son 100% puros, sino que poseen una cantidad determinada de otras sustancias llamadas impurezas. En la figura 6.4 se muestran dos etiquetas, correspondientes a las sales comerciales cloruro de sodio e hidrógeno carbonato de sodio (comúnmente conocida como bicarbonato de sodio), ¿podés indicar qué significa el valor 99,5% que se observa en la etiqueta de NaCl? La etiqueta de bicarbonato de sodio tiene en su parte inferior resultados de ensayos químicos realizados previo a su comercialización, ¿podés inferir qué significan estos resultados en relación con la pureza de esta sal?.

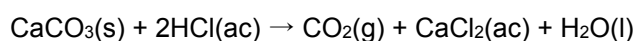
La pureza de las sustancias es un concepto sumamente importante a la hora de pensar las reacciones químicas. Como hemos mencionado, los reactivos utilizados en el laboratorio no son por lo general totalmente puros. La pureza de los reactivos se indica como un porcentaje del total de la muestra. En el caso de sustancias sólidas, suele indicarse en porcentaje en peso (masa), [% p/p]. Para la etiqueta de la sal NaCl, mostrada en la figura 6.4, el número 99,5% indica que cada 100 gramos del sólido que contiene el envase, 99,5 gramos son NaCl y el resto (0,5 gramos) son impurezas. Estos datos son de importancia ya que el componente puro de una sustancia es el único que participa de la reacción de interés. De este modo, cuando hacemos cálculos estequiométricos debemos tener en cuenta la pureza de los reactivos.

ESPECIFICACIONES	
PRODUCTO: SODIO BICARBONATO Pro-análisis (ACS)	
SINÓNIMO: Sodio Hidrógeno Carbonato	
CÓDIGO: 815	
FÓRMULA: NaHCO ₃	
CAS: 144-55-8	UN: □
PESO MOLECULAR: 84.01	
DENSIDAD: -	
ENSAYOS	Especificaciones
AMONIO (NH ₄)	MAX. 5 ppm
CLORURO (Cl)	MAX. 0.003 %
COMPUESTOS DE AZUFRE (COMO SO ₄)	MAX. 0.003 %
FOSFATO (PO ₄)	MAX. 0.001 %
HIERRO (Fe)	MAX. 0.001 %
INSOLUBLE	MAX. 0.015 %
METALES PESADOS (Pb)	MAX. 5 ppm
POTASIO (K)	MAX. 0.005 %
VALORACION (SOBRE BASE SECA)	99.7 - 100.3 %
Ca, Mg Y ppdo. R2O3	MAX. 0.02 %

Cloruro de Sodio
NaCl 99,5%
PM 58,44
Cas 1224 -24 -5

Figura 6.4. Etiquetas de las sales cloruro de sodio (Izquierda) y bicarbonato de sodio (Derecha).

Ejercicio tipo 6.4. El mármol, que es utilizado en la construcción edilicia, se compone mayormente de CaCO₃, pero también contiene impurezas como arcillas y cuarzo (SiO₂). Un método muy conocido para generar CO₂ es la reacción del carbonato de calcio con ácido clorhídrico. La ecuación que representa esta reacción se expresa a continuación:



Si se parte de una piedra de mármol de 3,00 gramos cuya pureza es de 75,0% p/p y se la hace reaccionar con 0,0100 moles de HCl, ¿cuánto CO₂(g) se producirá al finalizar el experimento? Expresalo en moles, gramos y litros.

Resolución

En este ejercicio partimos de una ecuación química balanceada que nos da información acerca de las relaciones cuantitativas entre reactivos y productos. Teniendo como datos las cantidades de los dos reactivos involucrados en la reacción, debemos determinar cuál de ellos es el limitante para luego calcular la cantidad de producto, CO_2 . Sin embargo, es necesario tener en cuenta que la muestra de mármol, que contiene el reactivo CaCO_3 , no es pura (75,0% p/p), y debemos determinar primero cuánto CaCO_3 hay en ella.

100 g de muestra (mármol) \rightarrow 75,0 g de $\text{CaCO}_3(\text{s})$ (puro)

3,00 g de muestra \rightarrow x = 2,25 g de $\text{CaCO}_3(\text{s})$

Así, 2,25 g es la cantidad del reactivo $\text{CaCO}_3(\text{s})$ puro que podría reaccionar. Con esta información, estamos en condiciones de determinar el reactivo limitante. De la ecuación química sabemos que 1 mol de CaCO_3 (100 g; $\text{MMR}(\text{CaCO}_3) = 100$) reacciona con 2 moles de HCl, ¿cuántos moles de HCl serán necesarios para que reaccionen 2,25 g de CaCO_3 ?

100 g $\text{CaCO}_3 \rightarrow$ 2 moles HCl

2,25 g $\text{CaCO}_3 \rightarrow$ x = 0,0450 moles de HCl

A partir de este cálculo determinamos que son necesarios 0,0450 moles de HCl para reaccionar con 2,25 g de CaCO_3 . Sin embargo, se dispone solo de 0,0100 moles de HCl, siendo este el *reactivo limitante*. A partir del reactivo limitante se calcula la cantidad de producto obtenida, teniendo en cuenta que, según la estequiometría de la reacción, 2 moles de HCl producen 1 mol de CO_2 :

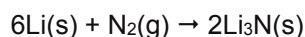
2 mol HCl \rightarrow 1 mol CO_2

0,0100 mol de HCl \rightarrow x = 0,00500 moles de CO_2

Así, se producirán 0,00500 moles de CO_2 , que equivalen a 0,220 g ($\text{MMR}(\text{CO}_2) = 44$) y a 0,112 L de CO_2 (1 mol de gas ideal en CNPT = 22,4 L).

Ejercicio propuesto 6.5. Calculá en qué cantidad de masa de cada una de las siguientes muestras hay 0,150 moles de sustancia pura: $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 70,0% p/p, NaCl 50,0% p/p, KCl 87,5% p/p.

Ejercicio propuesto 6.6. El litio y el nitrógeno reaccionan para producir nitruro de litio:



Si se desean obtener 0,500 moles de Li_3N . ¿Cuántos moles de Li deben reaccionar? Si para conseguir esa cantidad de Li se debió pesar 14,0 g de una muestra impura que contiene al metal, ¿cuál es la pureza de la muestra?

Rendimiento de una reacción química

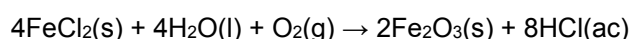
Hemos realizados diversos cálculos para determinar la cantidad de producto que se forma cuando reacciona todo el reactivo limitante, esto es, la *cantidad de producto teórica* o *cantidad de producto esperada*, según los cálculos estequiométricos.

La cantidad de producto que realmente se obtiene en una reacción, la *cantidad de producto real* o *cantidad de producto obtenida*, puede ser menor a la que se esperaba. Existen diversas causas que originan este hecho, entre ellas, las reacciones reversibles, la presencia de reacciones secundarias o la dificultad para recuperar todo el producto obtenido.

El **rendimiento** de una reacción química se calcula a partir de la comparación entre la cantidad de producto obtenida realmente y la esperada (teórica). Si una reacción química tiene un rendimiento de 100%, significa que la cantidad de producto obtenido coincide con la esperada. Si una reacción tiene un rendimiento menor a 100%, la cantidad de producto obtenida es menor a la esperada. Por ejemplo, si una reacción posee un rendimiento de 85%, significa que por cada 100 (moles, gramos, litros, etc.) que se esperaban obtener, se obtuvieron en realidad 85 (moles, gramos, litros, etc.). La cantidad de producto puede expresarse en cualquier unidad siempre que sea la misma para el producto obtenido y el esperado.

Cuando realizamos cálculos estequiométricos que involucran cantidad de producto es necesario tener en cuenta el rendimiento de la reacción.

Ejercicio tipo 6.5. Una de las vías para generar hematita (Fe_2O_3), un óxido de hierro con aplicaciones en la industria de los pigmentos, es la síntesis representada por la siguiente ecuación:

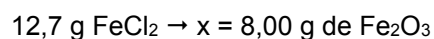
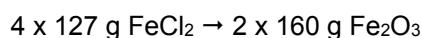


Se hacen reaccionar 12,7 g de la sal cloruro ferroso en exceso de agua y oxígeno. Calculá los gramos de hematita que se obtendrán, si el rendimiento de la reacción es de 70,0%.

Resolución

En este caso, no es necesario determinar el reactivo limitante ya que, el agua y el oxígeno están en exceso. De este modo, determinaremos la cantidad de producto a partir del reactivo en defecto, FeCl_2 .

En un primer paso, y teniendo en cuenta las relaciones estequiométricas, calcularemos la cantidad de producto teórica o esperada, esto es, considerando un rendimiento de 100%. De la ecuación, observamos que a partir de 4 moles de FeCl_2 (4×127 g; $\text{MMR}(\text{FeCl}_2) = 127$) se obtienen 2 moles de Fe_2O_3 (2×160 g; $\text{MMR}(\text{Fe}_2\text{O}_3) = 160$). Como se hacen reaccionar 12,7 g de FeCl_2 :



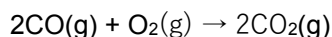
De este modo, hemos determinado que la cantidad de hematita esperada es 8,00 g. Sin embargo, el rendimiento de la reacción es de 70,0%, por lo tanto, la cantidad de producto obtenida será:

100 g esperados → 70,0 g obtenidos

8,00 g esperados → x = **5,60 g obtenidos**

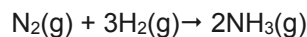
Así, la masa de hematita obtenida para un rendimiento de reacción de 70,0% es 5,60 g.

Ejercicio propuesto 6.7. El aumento de la concentración de monóxido de carbono en habitaciones cerradas, proveniente de la combustión incompleta de gas natural, es causante de un gran número de muertes por envenenamiento durante el invierno. La combustión de monóxido de carbono puede producirse mediante la reacción representada por la siguiente ecuación:



Si se mezclan 0,500 moles de $\text{CO}(\text{g})$ y 0,300 moles de $\text{O}_2(\text{g})$ ¿Qué cantidad de moles, gramos y litros de $\text{CO}_2(\text{g})$ se formará? Considera que el rendimiento de la reacción es de 100%. Supone que 1 mol de gas bajo las condiciones del ensayo ocupa un volumen de 22,4 L. ¿Qué cantidad de moles de $\text{CO}_2(\text{g})$ se formará si la reacción se produce con un 70,0% de rendimiento?

Ejercicio propuesto 6.8. El proceso comercial para la producción de amoníaco implica la reacción entre nitrógeno e hidrógeno, de acuerdo con la siguiente reacción:

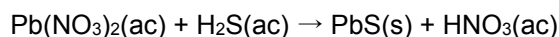


Si se obtienen 2,00 moles de NH_3 , con un rendimiento de reacción de 70,0 %, ¿Cuántos gramos de H_2 debieron reaccionar?

A modo de resumen, para realizar cálculos estequiométricos debemos tener en cuenta los siguientes pasos:

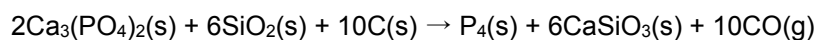
- 1) Identificar reactivos y productos.
- 2) Escribir la ecuación química balanceada.
- 3) Calcular la cantidad de reactivo/s puro/s, utilizando el dato de pureza.
- 4) Determinar el reactivo limitante.
- 5) Calcular la cantidad de producto/s obtenida teniendo en cuenta el rendimiento de la reacción.

Ejercicio propuesto 6.9. La precipitación de sulfuro de plomo se representa en la siguiente ecuación (sin balancear):



En un experimento de laboratorio se mezclaron 15 gramos de una muestra de $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ de 85% p/p de pureza con 0,20 moles de H_2S . Durante la experiencia se observó que el rendimiento de la reacción se redujo en un 15% ¿Qué masa de PbS se obtuvo?

Ejercicio propuesto 6.10. El fósforo blanco (P_4) se extrae de la “roca fosfórica” cuya fórmula es $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$, mediante su calentamiento en un horno por encima de los 1700 K, en presencia de arena (SiO_2) y coque (C). La reacción que da lugar a su obtención es:



Si se mezclaron 120 g de una muestra que contiene de $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$, con un exceso de arena y coque, y se obtuvieron 15,0 g de P_4 con un rendimiento del 90,0%, determiná la pureza de la muestra de fosfato de calcio.

Equivalente químico y peso equivalente

Hemos estudiado que la relación en la cual los reactivos se combinan para dar productos está dada por los coeficientes estequiométricos. Sólo en algunos casos, un mol de un reactivo se combina con un mol de otro reactivo para dar un mol de producto/s, esto es, gran parte de las reacciones químicas no se producen en una relación molar 1 a 1. Sin embargo, puede definirse una cantidad, denominada **equivalente químico** o **peso equivalente**, que cumple con la condición de que, los reactivos se combinan para dar productos en relación 1 a 1. Esto es, *un equivalente de un reactivo reacciona con un equivalente de otro reactivo para obtener un equivalente de producto/s*. Este concepto, puede aplicarse a cualquier reacción, pero se utiliza principalmente en reacciones ácido-base (donde hay transferencia de H^+) y en reacciones de oxidación-reducción (donde ocurre transferencia de electrones).

El peso equivalente se calcula dividiendo la masa molar (masa de un mol de sustancia), por el número de equivalentes involucrados en la reacción química correspondiente.

$$\text{Peso equivalente} = \frac{\text{Masa molar}}{\text{número de equivalentes}}$$

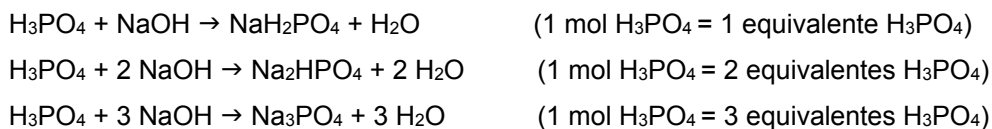
La definición de equivalente debe estar relacionada con el comportamiento químico de las sustancias en una determinada reacción, a fin de cumplir el objetivo de combinarlas en relación 1 a 1. El comportamiento químico de una sustancia está relacionado con la reacción en la que participa, por lo tanto, *el concepto de equivalente está ligado a un proceso químico definido*.

La ventaja de la utilización de equivalentes es que, una vez conocido el número de equivalentes de una de las especies participantes de una reacción química, se conoce el del resto, dada la relación equivalente a equivalente que afecta a reactivos y productos.

A continuación, definiremos equivalentes para ácidos, bases, sales y iones, que no participan de reacciones de oxidación-reducción. Este último tipo de reacciones serán presentadas en el capítulo 8.

Ácidos

Un mol de ácido pone en juego tantos equivalentes como moles de H^+ cede en una reacción de neutralización. Para analizar esto, tomemos el caso del ácido fosfórico (H_3PO_4), que puede participar en las siguientes reacciones de neutralización con NaOH :



En la primera reacción, el ácido fosfórico pierde un H^+ en la neutralización, resultando que un mol de ácido es un equivalente. Para la segunda neutralización, el ácido cede dos H^+ y, por tanto, 1 mol de ácido son dos equivalentes. La tercera reacción corresponde a la neutralización total de H_3PO_4 con pérdida de sus tres H^+ , siendo entonces un mol de ácido, tres equivalentes.

El peso equivalente para un ácido queda definido por:

$$\text{Peso equivalente (ácido)} = \frac{\text{Masa molar}}{\text{número de equivalentes}} = \frac{\text{Masa molar}}{\text{número de H}^+\text{ cedidos}}$$

Teniendo en cuenta que la masa molecular del ácido fosfórico es 98 g/mol, los pesos equivalentes de este ácido para cada una de las tres reacciones serán, respectivamente:

$$\text{Peso equivalente (H}_3\text{PO}_4) = \frac{98 \text{ g/mol}}{1 \text{ equivalente/mol}} = 98 \frac{\text{g}}{\text{equivalente}}$$

$$\text{Peso equivalente (H}_3\text{PO}_4) = \frac{98 \text{ g/mol}}{2 \text{ equivalentes/mol}} = 49 \frac{\text{g}}{\text{equivalente}}$$

$$\text{Peso equivalente (H}_3\text{PO}_4) = \frac{98 \text{ g/mol}}{3 \text{ equivalentes/mol}} = 32,7 \frac{\text{g}}{\text{equivalente}}$$

Bases

Un mol de base pone en juego tantos equivalentes como moles de OH^- cede la base en una reacción de neutralización. En este caso, el peso equivalente se define como:

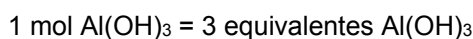
$$\text{Peso equivalente (base)} = \frac{\text{Masa molar}}{\text{número de equivalentes}} = \frac{\text{Masa molar}}{\text{número de OH}^-\text{ cedidos}}$$

Así, para una base como NaOH, que puede ceder un único OH^- y cuya masa molecular es 40 g/mol:



$$\text{Peso equivalente (NaOH)} = \frac{40 \text{ g/mol}}{1 \text{ equivalente/mol}} = 40 \frac{\text{g}}{\text{equivalente}}$$

Para el caso de la base Al(OH)_3 , que puede perder tres OH^- y cuya masa molecular es 78 g/mol:



$$\text{Peso equivalente (Al(OH)}_3) = \frac{78 \text{ g/mol}}{3 \text{ equivalentes/mol}} = 26 \frac{\text{g}}{\text{equivalente}}$$

Sales

Un mol de sal pone en juego tantos equivalentes como moles de carga positiva o negativa tiene la sal (en módulo, sin tener en cuenta el signo). En una sal el número total de cargas positivas provenientes de los cationes es igual al número total de cargas negativas provenientes de los aniones. El peso equivalente para una sal se define como:

$$\text{Peso equivalente (sal)} = \frac{\text{Masa molar}}{\text{número de equivalentes}} = \frac{\text{Masa molar}}{\text{número total de cargas positivas o negativas (en módulo)}}$$

De este modo, para la sal NaCl, el número total de cargas positivas aportadas por el catión Na⁺ (que coincide con el número de cargas negativas proveniente del Cl⁻) es 1. Así, 1 mol de NaCl es 1 equivalente de NaCl y su peso equivalente se define como:

$$\text{Peso equivalente (NaCl)} = \frac{58,5 \text{ g/mol}}{1 \text{ equivalente/mol}} = 58,5 \frac{\text{g}}{\text{equivalente}}$$

Para la sal Al₂(SO₄)₃, el número total de cargas positivas aportadas por el catión Al³⁺ es 6, ya que hay dos cationes por fórmula. Este número coincide con las cargas negativas proveniente del anión SO₄²⁻, que aporta en módulo una carga total de 6 originadas en los tres aniones que componen a la sal. Así, 1 mol de Al₂(SO₄)₃ son 6 equivalentes de Al₂(SO₄)₃ y su peso equivalente se define como:

$$\text{Peso equivalente (Al}_2\text{(SO}_4\text{)}_3\text{)} = \frac{342 \text{ g/mol}}{6 \text{ equivalentes/mol}} = 57 \frac{\text{g}}{\text{equivalente}}$$

Iones

En 1 mol de iones el número de equivalentes coincide con la carga del ion, en módulo, y su peso equivalente se define como:

$$\text{Peso equivalente (ion)} = \frac{\text{Masa molar}}{\text{número de equivalentes}} = \frac{\text{Masa molar}}{\text{carga del ion}}$$

De acuerdo con lo que hemos definido, para los iones Na⁺, Al³⁺ y SO₄²⁻, el número de equivalentes por mol y sus pesos equivalentes son:

$$1 \text{ mol de Na}^+ = 1 \text{ equivalente de Na}^+$$

$$\text{Peso equivalente (Na}^+\text{)} = \frac{23 \text{ g/mol}}{1 \text{ equivalente/mol}} = 23 \frac{\text{g}}{\text{equivalente}}$$

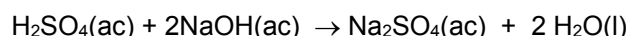
$$1 \text{ mol SO}_4^{2-} = 2 \text{ equivalentes de SO}_4^{2-}$$

$$\text{Peso equivalente } (SO_4^{2-}) = \frac{96 \text{ g/mol}}{2 \text{ equivalentes/mol}} = 48 \frac{\text{g}}{\text{equivalente}}$$

$$1 \text{ mol } Al^{3+} = 3 \text{ equivalentes de } Al^{3+}$$

$$\text{Peso equivalente } (Al^{3+}) = \frac{27 \text{ g/mol}}{3 \text{ equivalentes/mol}} = 9 \frac{\text{g}}{\text{equivalente}}$$

Ejercicio tipo 6.6. Indicá el número de moles y de equivalentes de cada reactivo que reaccionan, según la siguiente ecuación química balanceada. Determiná el peso equivalente del ácido, la base y la sal.



Resolución

La ecuación representa la neutralización total del ácido sulfúrico con hidróxido de sodio. Como puede observarse, cada mol de H_2SO_4 pierde dos H^+ y, por tanto, 1 mol de $H_2SO_4 = 2$ equivalentes de H_2SO_4 . En cuanto al $NaOH$, cada mol de base cede un OH^- , esto es, 1 mol de $NaOH = 1$ equivalente de $NaOH$. Para el caso de la sal, Na_2SO_4 , el número total de cargas aportadas por el catión Na^+ es 2, ya que hay dos cationes por fórmula (este número coincide con las cargas aportadas por el anión sulfato), entonces, 1 mol de $Na_2SO_4 = 2$ equivalentes de Na_2SO_4 . En el siguiente cuadro se resumen estas conclusiones y se puede visualizar que la relación de equivalentes entre productos y reactivos es 1:1, mientras que la relación en moles no lo es.

	$H_2SO_4 + 2 NaOH \rightarrow Na_2SO_4 + 2 H_2O$			
Moles →	1	2	1	2
Equivalentes →	2	2	2	2
	1	1	1	1

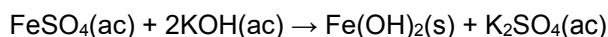
Los pesos equivalentes serán:

$$\text{Peso equivalente } (H_2SO_4) = \frac{98 \text{ g/mol}}{2 \text{ equivalentes/mol}} = 49 \frac{\text{g}}{\text{equivalente}}$$

$$\text{Peso equivalente } (NaOH) = \frac{40 \text{ g/mol}}{1 \text{ equivalente/mol}} = 40 \frac{\text{g}}{\text{equivalente}}$$

$$\text{Peso equivalente } (Na_2SO_4) = \frac{142 \text{ g/mol}}{2 \text{ equivalente/mol}} = 71 \frac{\text{g}}{\text{equivalente}}$$

Ejercicio tipo 6.7. Se mezclan 0,50 equivalentes de FeSO_4 con 0,30 equivalentes de KOH según la siguiente ecuación:



- a) Determiná cuál es el reactivo limitante. ¿Podés determinarlo sin hacer ningún cálculo?
b) Calculá la cantidad de equivalentes y la masa de $\text{Fe}(\text{OH})_2$ formados.

Resolución.

a) Una de las ventajas del uso de equivalentes es el hecho de que, como en toda reacción química, la relación de equivalentes entre las especies participantes es 1 a 1. Por lo tanto, con sólo analizar el número de equivalentes de los reactivos podemos concluir que aquel que sea menor corresponde al reactivo limitante. *¡Esto no puede hacerse con moles o con masa!* En este caso se combinan 0,50 equivalentes de FeSO_4 con 0,30 equivalentes de KOH , por lo tanto, **el reactivo limitante es KOH .**

b) Como hemos estudiado, para calcular la cantidad de producto formada, tomamos como base el reactivo limitante, que en este caso es KOH . Nuevamente, para determinar el número de equivalentes del producto, $\text{Fe}(\text{OH})_2$, no necesitamos hacer ningún cálculo, este coincidirá con el número de equivalentes del reactivo limitantes, esto es, **se formarán 0,30 equivalentes de $\text{Fe}(\text{OH})_2$.** La masa de este producto la calculamos sabiendo que 1 mol de $\text{Fe}(\text{OH})_2$ (MMR = 90; 1 mol = 90 g) son 2 equivalentes:



Ejercicio propuesto 6.11. Calculá el número de equivalentes presentes en: a) 3 moles de ácido nítrico (cómo ácido); b) 150 g de sulfato de aluminio (como sal); c) 40 g de hidróxido de calcio; d) 0,15 moles de ácido fosfórico (para dar hidrógeno fosfato de sodio). Determiná los pesos equivalentes de cada uno de los compuestos.

Ejercicio propuesto 6.12. El ácido cítrico tienen sabor agrio y es el causante de la acidez del jugo de naranja. Una muestra de 1,50 litros de jugo de naranja se hizo reaccionar de forma completa con 0,139 moles de NaOH . Si el ácido cítrico es el único componente del jugo de naranja que reacciona y lo hace como ácido monoprótico, ¿cuántos equivalentes de ácido cítrico hay en 1,00 L de muestra? ¿y cuántos gramos? Peso equivalente (ácido cítrico) = 192 g/equivalente.

Ejercicio propuesto 6.13. Una base formada a partir de un metal alcalino tiene un peso equivalente de 102,5 g/equivalente. Se hicieron reaccionar por completo 450,0 g de esta base con 135,7 g de un ácido poliprótico (un ácido que tiene más de un H^+) desconocido ¿cuántos equivalentes de producto se formaron?

Posteriormente se pudo conocer que 1 mol del ácido poliprótico corresponde a 2 equivalentes del mismo. Identificá si se trató de H_3AsO_4 , H_3PO_4 , H_3PO_3 o H_3BO_3 .

Respuesta de los ejercicios propuestos

Ejercicio propuesto 6.1.

- a) $2\text{NaOH}(\text{ac}) + \text{H}_2\text{SO}_4(\text{ac}) \rightarrow \text{Na}_2\text{SO}_4(\text{ac}) + 2\text{H}_2\text{O}(\text{l})$
 b) $2\text{NaHCO}_3(\text{ac}) \rightarrow \text{Na}_2\text{CO}_3(\text{ac}) + \text{H}_2\text{O}(\text{l}) + \text{CO}_2(\text{g})$
 c) $6\text{Li}(\text{s}) + \text{N}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{Li}_3\text{N}(\text{s})$

Ejercicio propuesto 6.2.

- a) $\text{Al}_2\text{S}_3(\text{s}) + 6\text{H}_2\text{O}(\text{l}) \rightarrow 2\text{Al}(\text{OH})_3(\text{s}) + 3\text{H}_2\text{S}(\text{g})$
 b) Son necesarios 4,86 g de Al_2S_3 .
 c) Se producen 0,0648 moles de $\text{Al}(\text{OH})_3$.
 d) Se forman $5,85 \times 10^{22}$ moléculas de H_2S .

Ejercicio propuesto 6.3.

- Se necesita 2,45 g de Na_2CrO_4 .
 Se forman 0,0151 moles de PbCrO_4 .
 Se producen 2,57 g de NaNO_3 .

Ejercicio propuesto 6.4.

- a) El O_2 es el reactivo limitante.
 b) Se forman 0,105 moles de NO .
 c) 0,425 g de NH_3 quedan sin reaccionar.

Ejercicio propuesto 6.5.

Hay 0,150 moles de sustancia pura en 15,9 g de muestra de $\text{Ca}(\text{OH})_2$; 17,6 g de NaCl y 12,8 g de KCl .

Ejercicio propuesto 6.6.

- Deben reaccionar 1,50 moles de Li .
 La pureza de la muestra es de 75,0%.

Ejercicio propuesto 6.7.

- Se formarán 0,500 moles de CO_2 que equivalen a 22,0 g y 11,2 L.
 Si el rendimiento de la reacción fuera 70,0%, se formarán 0,35 moles de CO_2 .

Ejercicio propuesto 6.8.

- Debieron reaccionar 8,57 g de H_2 .

Ejercicio propuesto 6.9.

- Se obtuvieron 7,8 g de PbS .

Ejercicio propuesto 6.10.

- La pureza de la muestra de fosfato de calcio es de 69,4% p/p.

Ejercicio propuesto 6.11.

- a) 3 equivalentes de HNO_3 . Peso equivalente (HNO_3) = 63 g/equivalente.
- b) 2,63 equivalentes de $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$. Peso equivalente ($\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$) = 57 g/equivalente.
- c) 1,1 equivalentes de $\text{Ca}(\text{OH})_2$. Peso equivalente ($\text{Ca}(\text{OH})_2$) = 37 g/equivalente.
- d) 0,30 equivalentes de H_3PO_4 . Peso equivalente (H_3PO_4) = 49 g/equivalente.

Ejercicio propuesto 6.12.

En 1,00 L de muestra hay 0,0930 equivalentes y 17,8 g de ácido cítrico.

Ejercicio propuesto 6.13.

Se formaron 4,390 equivalentes de producto. El compuesto es el ácido bórico, H_3BO_3 .

Referencias

Nelson, D. L., Cuchillo Foix, C. M., Lehninger, A. L., & Cox, M. M. (2005). *Lehninger: Principios de Bioquímica* (4a. ed.). Barcelona: Omega.

CAPÍTULO 7

Soluciones

Sofía Sampaolesi

En este capítulo estudiaremos distintos aspectos de mezclas de dos o más componentes de características homogéneas, denominadas **soluciones**. En particular, nos interiorizaremos en las propiedades de las soluciones acuosas, en las que el componente en mayor proporción y responsable de muchas de las características de la mezcla es el agua líquida. Ejemplos de soluciones acuosas son el océano; el plasma sanguíneo y otros fluidos corporales; el líquido refrigerante para motores; ciertos antibióticos y medicamentos en presentación líquida; entre otros elementos de un universo muy amplio y variado. Entre los aspectos que estudiaremos se incluyen la composición, la concentración y la densidad de soluciones acuosas, su determinación experimental y los métodos analíticos que pueden emplearse a tal fin. Además, indagaremos en ciertas transformaciones químicas que pueden ocurrir en el seno de una solución acuosa.

Lectura inicial

El cuerpo humano está constituido por más de un 70% de **agua en estado líquido**. En nuestro organismo, el agua no se encuentra como sustancia pura, sino que constituye el **solvente** de una variedad de sales, azúcares, gases y metabolitos fundamentales para la vida. La presencia y concentración de estas sustancias **solutos** determinan muchas de las características de los organismos y sus células y resultan esenciales para el desarrollo de fenómenos biológicos.

A nivel intracelular, es decir, al interior de cada célula de nuestro organismo, gran parte de su volumen se encuentra ocupado por **solución acuosa**. El citoplasma es un compartimento celular de gran tamaño y aspecto granuloso. Se compone del citosol, una solución acuosa compleja y altamente concentrada, que disuelve una gran variedad de metabolitos celulares, macromoléculas, iones inorgánicos y enzimas; y de una fracción de componentes **insolubles**, llamados orgánulos celulares, como las mitocondrias y los ribosomas, que se encuentran dispersados o suspendidos en el citosol, aunque no solubilizados. El citoplasma se define entonces como una **suspensión coloidal**, cuya función biológica es permitir el movimiento coordinado de los orgánulos celulares y la difusión de **moléculas disueltas**, tanto nutrientes como productos del metabolismo celular y sustancias residuales.

Los glóbulos rojos o eritrocitos son las células sanguíneas responsables del transporte de los gases respiratorios oxígeno y dióxido de carbono a través de la circulación. Estas células carecen de núcleo, por lo que todo su interior se encuentra ocupado por el citoplasma. El tamaño de un eritrocito cambia de forma inmediata al producirse variaciones en la relación entre la **concentración** de solutos en su interior y la concentración de solutos en el medio que lo rodea. Cuando las concentraciones de solutos en el interior celular y en el medio externo son iguales entre sí e iguales a la concentración del plasma sanguíneo, el eritrocito adopta un tamaño óptimo y el medio se denomina **isotónico** (“iso”: igual). Cuando la concentración de solutos en el interior celular es mayor que en el exterior, ingresa gran cantidad de agua para **solubilizarlos** y la célula aumenta su tamaño rápidamente, pudiendo incluso llegar a estallar. La solución del medio externo se denomina, en este caso, **hipotónica** (“hipo”: por debajo de). En el caso contrario, cuando la concentración de solutos en el interior celular es menor que en el exterior, el agua escapa del eritrocito hacia el medio externo, que en este caso constituye una solución **hipertónica** (“hiper”: por encima de). El efecto de este flujo de agua es la reducción drástica del tamaño de la célula, que puede llegar a morir por deshidratación (Cingolani, 2014).

La presencia de solutos en el medio intracelular tiene también efecto sobre el crecimiento de todo tipo de células; en células animales y vegetales el tamaño puede variar entre los 5 y los 100 μm . A medida que una célula aumenta su tamaño, el tiempo que tarda una molécula en recorrer la distancia entre la superficie celular y el centro es mayor. Debido a que la llegada de nutrientes y la secreción de residuos metabólicos debe ocurrir rápidamente para que la célula pueda vivir, el tamaño celular máximo está limitado por la velocidad de difusión de solutos hacia y desde el interior de la célula.

En las plantas, el mantenimiento de **soluciones acuosas concentradas** en el interior de sus células determina que estos organismos puedan tener una estructura. El espacio intracelular vegetal de plantas maduras está ocupado en un 90% por la vacuola central. La vacuola es una organela que se encuentra en el citoplasma y que está delimitada por una membrana especial que se denomina tonoplasto y que regula la entrada selectiva de solutos a la vacuola. Al mantener una elevada concentración de solutos en el interior vacuolar, se favorece el ingreso de agua a las células vegetales. Este gran volumen de agua ejerce una **presión de turgencia** sobre las paredes celulares de toda la planta, permitiendo que ésta adopte una estructura erigida y estable. De aquí la expresión de “turgente” para describir una planta que se observa sana, fuerte e hidratada (Nelson, 2005).

Soluciones

Las **sustancias puras** son aquellas cuya identidad está bien definida y es única y constante en toda la porción de materia estudiada. Cuando una sustancia no es pura, estamos en presencia de una **mezcla** de sustancias. Mientras que las sustancias puras tienen una composición fija, la composición de una mezcla puede variar. Por ejemplo, una taza de leche chocolatada puede

tener mayor o menor cantidad de cacao en polvo. La leche y el cacao son las sustancias **componentes** de esa mezcla. Una mezcla conserva su identidad, es decir, tiene un conjunto de propiedades físicas propias, que pueden ser diferentes de las propiedades de las sustancias componentes. Podemos pensar en el color y el aroma de la leche chocolatada, que son propios de la mezcla, y distintos de los aromas y colores de la leche y el cacao en polvo. A su vez, mezclas constituidas por las mismas sustancias componentes, pero en distintas proporciones, tendrán propiedades diferentes. Continuando con el ejemplo, puede observarse la intensificación del color de una leche chocolatada cuando se agrega mayor cantidad de cacao en polvo a la mezcla; es decir, al variar la **composición de la mezcla** cambió su color.

Otra característica interesante de las mezclas es que estas pueden no tener la misma composición, propiedades y aspecto en todos sus puntos. Tales mezclas, como la arena o una emulsión de agua-aceite, se denominan **heterogéneas**. Por otro lado, aquellas mezclas que son uniformes en todos sus puntos, como la resultante de agregar una cucharadita de sal a un vaso con agua, el aire o una aleación metálica, son llamadas **homogéneas**. Un caso especial de mezcla homogénea cuyo componente mayoritario es el agua líquida se denomina disolución o **solución acuosa**.

Aproximadamente dos terceras partes de nuestro planeta están cubiertas por agua, que es, también la sustancia más abundante de nuestro organismo. El agua es una sustancia ubicua, común y a la vez excepcional, cuyas particulares propiedades químicas son indispensables para la existencia de la vida en la Tierra. Una de las propiedades más importantes del agua es su capacidad para disolver una amplia variedad de sustancias. En la naturaleza, el agua siempre contiene sustancias disueltas: los océanos son soluciones acuosas de una variedad de sales y compuestos orgánicos producidos por la fauna y flora que los habitan; el plasma sanguíneo es una solución acuosa que transporta células sanguíneas, nutrientes y gases disueltos a todo el organismo; la leche es una solución acuosa de minerales y el azúcar lactosa, y es también una **suspensión** de proteínas y una **emulsión** de lípidos.

Aquí hay una interesante distinción que debemos hacer. Mientras que una **suspensión** puede a simple vista parecer homogénea, como ocurre con la leche, a nivel microscópico se observa que se trata de una **mezcla heterogénea** de un sólido fino disperso en un líquido, que no se disuelve. Las **emulsiones**, por otro lado, ocurren a partir de la **mezcla de dos líquidos inmiscibles**, que forman finalmente una dispersión de un líquido en otro. La leche es una dispersión de gotas de lípidos (aceites) rodeadas de gotas de agua; la manteca, a la inversa, es una emulsión donde las gotas de agua se encuentran rodeadas por gotas de lípidos. Tanto las emulsiones como las suspensiones de sólidos finos en un líquido se conocen como **coloides** o **suspensiones coloidales**.

Una **disolución** o **solución** se caracteriza por el establecimiento de interacciones entre las partículas (moléculas, iones, átomos) de sus distintos componentes. En el caso de las soluciones acuosas, las moléculas de agua, que es la sustancia disolvente o **solvente**, rodean e interactúan con las sustancias disueltas en el agua, que son los **solutos**. Esta interacción no modifica la identidad de los componentes de la solución, es decir, *no se produce transformación química*,

pero tiene efecto en las propiedades químicas y físicas de la mezcla, que son, como ya se mencionó, distintas de las propiedades de las sustancias componentes. Este fenómeno de interacción de las moléculas de agua con las moléculas de soluto se denomina **solvatación**.

Recuperando el ejemplo inicial, estamos en condiciones de afirmar que la leche chocolatada no se trata de una simple solución, puesto que la leche, el componente en mayor proporción de dicha mezcla, forma parte de una solución, una emulsión y también una suspensión acuosa. ¿Conocés otros ejemplos de soluciones acuosas? Te invitamos a investigar cómo podrías distinguir las de otras mezclas, como las emulsiones o las suspensiones.

Propiedades de las soluciones

Como se estudió en el capítulo 2, las propiedades de la materia se clasifican de acuerdo a su dependencia de la masa en **propiedades extensivas**, aquellas que dependen de la cantidad de materia del sistema, y **propiedades intensivas**, aquellas independientes de la cantidad de materia y que permiten identificar a una sustancia pura. En el caso de una solución, que no es una sustancia pura, sus propiedades intensivas nos permiten caracterizar a la mezcla. En este apartado profundizaremos el estudio de dos propiedades intensivas de las soluciones, fundamentales para el trabajo en el laboratorio y en la industria, la **concentración** y la **densidad**.

La densidad de una sustancia pura o mezcla se define como la relación entre la masa de una porción de ese sistema y el volumen que ocupa dicha porción, y se simboliza con la letra griega ρ (rho). De esta definición es posible inferir que la densidad de una cierta solución puede determinarse experimentalmente midiendo, con la precisión adecuada, la masa de un volumen de esta solución y calculando:

$$\rho = \frac{\text{masa de la solución}}{\text{volumen de la solución}} \quad [7.1]$$

La densidad es entonces una magnitud compuesta, cuyas unidades más comúnmente utilizadas son, **kg/m³**, **g/cm³** y **g/mL**. Recordemos que la densidad depende de la temperatura del sistema, ya que, si bien la masa no varía con esta, el volumen, en mayor o menor medida, cambia con la temperatura. En el caso de las mezclas, la densidad también depende de las proporciones de sus componentes: dos soluciones formadas por idénticos componentes combinados en diferentes proporciones, tendrán diferentes densidades.

La proporción en la que se combinan los componentes de una solución se expresa a través de su **concentración**. Esta propiedad se define como la cantidad de soluto disuelta en una cierta cantidad de solvente o de solución:

$$\text{Concentración} = \frac{\text{cantidad de soluto}}{\text{cantidad de solvente o de solución}} \quad [7.2]$$

Nuevamente, encontramos una magnitud compuesta, donde la cantidad de soluto suele expresarse en términos de masa o número de moles, mientras que la cantidad de solvente o de solución acuosa suele expresarse en términos de volumen, puesto que estas soluciones se caracterizan por su estado de agregación líquido a temperatura ambiente. Ocasionalmente, la cantidad de solvente o de solución se expresa en términos de masa. En el caso de soluciones de solutos líquidos en agua, como las soluciones de etanol en agua, la cantidad de soluto suele expresarse en términos de volumen.

Debido a que, en ocasiones, las unidades de densidad se asemejan a las unidades de concentración de una solución (g/L o g/cm³), es un error muy común el utilizar indistintamente estas magnitudes. Sin embargo, al leer nuevamente los párrafos previos, se comprueba que estos conceptos representan propiedades diferentes de una solución. Mientras que la concentración vincula cantidades de *soluto* y *solvente* (o *solución*) (ecuación [7.2]), la densidad es la relación entre la masa *de una solución* y el volumen que dicha masa *de solución* ocupa (ecuación [7.1]).

Las unidades de concentración pueden clasificarse en **unidades físicas** y **unidades químicas**. Las unidades denominadas físicas, no incorporan ningún concepto químico; si quisiéramos preparar una solución de una determinada concentración en estas unidades no necesitaríamos conocer la naturaleza química de sus componentes. A continuación, definiremos algunas unidades físicas de uso común, entre paréntesis indicaremos cómo se simbolizan:

Porcentaje peso en peso (% p/p): gramos (g) de **soluto** disueltos en 100 gramos (g) de **solución**.

Porcentaje peso en volumen (% p/v): gramos (g) de **soluto** disueltos en 100 mililitros (mL) de **solución**.

Porcentaje volumen en volumen (% v/v): mililitros (mL) de **soluto** disueltos en 100 mililitros (mL) de **solución**.

Gramos por litro (g/L): gramos (g) de **soluto** disueltos en 1 litro (L) de **solución**.

Partes por millón (ppm): puede expresarse en términos de masa o de volumen. Gramos de **soluto** por cada 1000000 de gramos de **solución**, esto es, por ejemplo, miligramos (mg) de **soluto** disueltos en 1 kilogramo (kg) de **solución**. Si se expresa en volumen: mililitros (mL) de **soluto** disueltos en 1000000 de mililitros de **solución** (mililitros de **soluto** disueltos en 1 litro de **solución**).

Partes por billón (ppb): puede expresarse en términos de masa o de volumen. Microgramos (µg) de **soluto** disueltos en 1 kilogramo (kg) de **solución** o microlitros (µL) de **soluto** disueltos en 1 litro (L) de **solución**.

Para soluciones acuosas diluidas, se aproxima la densidad de la solución a la densidad del agua a temperatura ambiente ($\approx 1 \text{ g/mL}$), por lo que se asume que 1 kg de solución ocupará un volumen de 1 L. Así, es común ver las unidades ppm, como mg/L (mg de **soluto** disueltos en 1 L de **solución**) y las unidades ppb como $\mu\text{g/L}$ (μg de **soluto** disueltos en 1 L de **solución**). Estas unidades son útiles para expresar la concentración de soluciones compuestas por una proporción de soluto muy pequeña. Se usan, por ejemplo, para indicar las concentraciones máximas permitidas de alguna sustancia contaminante en el agua o en el aire según las legislaciones vigentes.

Es importante notar que, si quisiéramos preparar una solución en cualquiera de estas unidades, podemos hacerlo aun desconociendo la fórmula química de los componentes. Imaginemos que necesitamos preparar 100 g de solución de concentración 5,00% p/p del soluto B en el solvente A. Sólo necesitamos pesar 5,00 g de B, operación que podemos hacer aun sin saber cuál es la sustancia B, y luego agregar el solvente A (del que también podemos desconocer su composición química) hasta que completar una masa total de 100 g.

En cuanto a las unidades de concentración denominadas químicas, es requisito conocer la naturaleza del soluto y, en algunas de ellas también la del solvente, cuando necesitamos utilizar su masa molecular. A continuación, definiremos este tipo de unidades de concentración:

Molaridad (M): moles de **soluto** disueltos en 1000 mL (1 L) de **solución**.

Normalidad (N): equivalentes de **soluto** disueltos en 1000 mL (1 L) de **solución**.

Molalidad (m): moles de **soluto** disueltos en 1000 g (1 kg) de **solvente**.

Fracción molar (x_i): cociente entre los moles de un componente (i) y el total de moles de la solución (que es la suma de los moles de soluto/s y de solvente). Si tenemos una solución compuesta por un único soluto y el solvente:

$$\text{Fracción molar de } \mathbf{soluto} = x_{\mathbf{soluto}} = \frac{\text{moles } \mathbf{soluto}}{\text{moles}_{\mathbf{soluto}} + \text{moles } \mathbf{solvente}} \quad [7.3]$$

$$\text{Fracción molar de } \mathbf{solvente} = x_{\mathbf{solvente}} = \frac{\text{moles } \mathbf{solvente}}{\text{moles}_{\mathbf{soluto}} + \text{moles } \mathbf{solvente}} \quad [7.4]$$

Como es de esperar, por tratarse de una fracción, $0 \leq x_i \leq 1$, indicando $x_i = 0$ la ausencia del componente i, y $x_i = 1$ la presencia única de este componente. Asimismo, la suma de las fracciones molares de todos los componentes de la solución será igual a 1 ($x_{\mathbf{soluto}} + x_{\mathbf{solvente}} = 1$).

$$x_{\mathbf{soluto}} + x_{\mathbf{solvente}} = \frac{\text{moles } \mathbf{soluto}}{\text{moles}_{\mathbf{soluto}} + \text{moles } \mathbf{solvente}} + \frac{\text{moles } \mathbf{solvente}}{\text{moles } \mathbf{soluto} + \text{moles } \mathbf{solvente}} = 1$$

Las unidades descritas nos permiten cuantificar la cantidad de soluto presente en una determinada cantidad de solución o de solvente. Las soluciones también pueden clasificarse, de modo cualitativo, en **soluciones diluidas** y **soluciones concentradas**. Al comienzo de este capítulo analizamos que una solución es una mezcla homogénea de composición variable. Así, si tomáramos un vaso con 100 mL de agua y agregáramos cantidades crecientes de sal de mesa, tendríamos soluciones de distinta composición. Existirá una cantidad máxima de sal que podemos disolver en los 100 mL de agua, a una temperatura dada, que corresponde a lo que se denomina **solución saturada**, que estará relacionada con la **solubilidad** de la sal en agua. Así, *la solubilidad es la máxima cantidad de soluto disuelto por unidad de volumen de solución o de solvente, a una cierta temperatura y presión*, y corresponde a la concentración de soluto de una solución saturada. Diremos entonces que, una solución de concentración mucho menor a la concentración de una solución saturada es diluida, y aquella con una concentración cercana a la saturación, es concentrada.

Conversión entre unidades de concentración

Durante el trabajo en el laboratorio se utilizan soluciones acuosas de distinta naturaleza, origen comercial y concentración, de acuerdo con sus objetivos de uso. Por este motivo, resulta fundamental poder convertir unidades de concentración que nos permitan comparar soluciones, obtener unas a partir de otras existentes y realizar todo tipo de cálculos que se requieren en la práctica. A continuación, discutiremos la resolución de algunos ejercicios típicos de conversión de unidades de concentración de soluciones.

Ejercicio tipo 7.1. ¿Cuál es la molaridad de una solución acuosa 25,0% p/v de NaOH?

Resolución

Esta unidad de concentración indica que la solución con la que se cuenta contiene 25,0 g del soluto NaOH en 100 mL de solución. Se puede considerar entonces una porción de 100 mL y calcular cuántos moles de soluto están contenidos en dicho volumen. Para ello, se debe utilizar el dato de masa molar del NaOH (MMR = 40,0):

$$40,0 \text{ g NaOH} \rightarrow 1 \text{ mol de NaOH}$$

$$25,0 \text{ g NaOH} \rightarrow x = 0,625 \text{ moles de NaOH (contenidos en 100 mL de solución)}$$

Como la molaridad se define por litro de solución (1000 mL), debemos realizar el cálculo pertinente para averiguar cuántos moles de soluto están contenidos en dicho volumen:

$$100 \text{ mL solución} \rightarrow 0,625 \text{ moles de NaOH}$$

$$1000 \text{ mL solución} \rightarrow x = 6,25 \text{ moles de NaOH}$$

La solución de NaOH es 6,25 M

Es importante resaltar que, para realizar la conversión de unidades requerida en el ejercicio tipo 7.1, fue necesario conocer, además de las concentraciones desde la que se partía y a la que se deseaba llegar, la identidad del soluto y su masa molar, ya que la molaridad es una unidad de concentración química. En otros casos, es necesario como dato adicional la densidad de la solución.

Ejercicio tipo 7.2. ¿Cuál es la molalidad (m) de una solución 6,250 M de NaOH, cuya densidad es 1,270 g/mL?

Resolución

Ambas unidades de concentración se expresan en moles de **soluto**. Sin embargo, la concentración molar se refiere a los moles de soluto disueltos en 1000 mL de **solución**, mientras que la molalidad son los moles disueltos en 1000 g de **solvente**.

En principio, es posible calcular la masa de una porción de 1000 mL de solución 6,250 M de NaOH a través del dato de su densidad, 1,270 g/mL:

1 mL de **solución** → 1,270 g de **solución**

1000 mL de **solución** → x = 1270 g de **solución (contiene 6,250 moles de NaOH)**

Teniendo en cuenta que la masa de la **solución** es igual a la suma de la masa del **solvente** y la masa del **soluto**, es posible averiguar la masa de solvente contenida en 1270 g de solución, calculando previamente la masa de soluto correspondiente a los moles presentes en dicha masa de solución:

1 mol de NaOH → 40,00 g de NaOH

6,250 moles de NaOH → x = 250,0 g de NaOH (contenidos en 1270 g de **solución**)

Masa de **solvente** = masa de **solución** - masa de **soluto** = 1270 g – 250,0 g = 1020 g

Es decir, 1020 g de solvente contienen 6,250 moles de NaOH (250,0 g). Para averiguar su molalidad, se debe referir a una masa final de 1000 g de **solvente**:

1020 g de **solvente** → 6,250 moles de NaOH

1000 g de **solvente** → x = 6,127 moles de NaOH **La solución de NaOH es 6,127 m**

Ejercicio tipo 7.3. Calculá la fracción molar de soluto y la de solvente de una solución 6,13 molal de NaOH.

Resolución

La solución contiene **6,13 moles de NaOH** en 1000 g de solvente. Se deben averiguar los moles de solvente contenidos en la solución. Es posible calcular esta cantidad considerando la masa molar del agua, que es 18,0 g/mol:

18,0 g de agua → 1 mol de agua

1000 g de agua → x = **55,6 moles de agua** (corresponden a los moles de **solvente**)

$$x_{NaOH} = \frac{\text{moles}_{NaOH}}{\text{moles}_{NaOH} + \text{moles}_{agua}} = \frac{6,13 \text{ moles}}{6,13 \text{ moles} + 55,6 \text{ moles}} = 0,0993$$

Como la suma de las fracciones molares de soluto y solvente es 1:

$$x_{agua} = 1 - x_{NaOH} = 1 - 0,0993 = 0,9007$$

Otro modo de calcular la fracción molar del solvente es a través de su definición, representada por la ecuación [7.4], y el resultado de esa operación debería coincidir con el aquí presentado. Te invitamos a comprobarlo.

Ejercicio propuesto 7.1. Completá el siguiente cuadro con las correspondencias entre unidades.

Solución acuosa	Molaridad	Normalidad	g/L	% p/p	Molalidad	Densidad
NaNO ₂	0,280 M					1,03 g/mL
MgCl ₂				25,5 %p/p		1,30 g/mL
K ₃ PO ₄		1,52 N				1,08 g/mL
FeSO ₄					0,741 m	1,10 g/mL

Preparación de soluciones

Las soluciones que se emplean comúnmente en el laboratorio suelen comprarse o prepararse en forma concentrada y se conocen como **soluciones stock (solución concentrada)**. Por ejemplo, el ácido clorhídrico se adquiere como solución concentrada 12 M y el ácido fosfórico como solución 99,0% p/v. A partir de las soluciones stock se pueden obtener soluciones de menor concentración agregando solvente. Este proceso, que permite obtener las llamadas **soluciones de trabajo (solución diluida)**, se denomina **dilución**.



Figura 7.1. Soluciones de Cu_2SO_4 , stock (izquierda) y diluida (derecha). Extracto del video-capítulo del Manual Digital de Laboratorio CEAEQ, publicado en <https://www.youtube.com/watch?v=jVv4RZQ97Iq&t=12s>

Cuando se adiciona solvente a una solución, la cantidad de soluto no cambia, únicamente se aumenta la cantidad de solvente y por lo tanto, disminuye su concentración. Esto es tangible al observar el resultado de diluir soluciones de compuestos coloreados, como el CuSO_4 (Figura 7.1). Tener esta consideración presente facilita calcular la cantidad de solución stock que se requiere para producir una cierta cantidad de solución diluida de la concentración necesaria. Puesto que se conoce tanto el volumen como la concentración de la solución diluida que se desea preparar, es posible calcular los moles de soluto que posee. Estos moles de soluto deberán estar contenidos en el volumen de solución stock que se debe tomar para preparar la solución diluida.

Ejercicio tipo 7.4. Se requiere preparar 150,0 mL de una solución 0,300 M de HCl a partir de una solución comercial 12,0 M ¿qué volumen de la solución de partida se necesitará?

Resolución

Inicialmente, se calcula el número de moles de soluto necesarios para preparar la solución diluida:

1000 mL solución diluida \rightarrow 0,300 moles de HCl

150,0 mL solución diluida \rightarrow $x = 0,0450$ moles de HCl (se tomar de la solución 12,0 M)

A continuación, considerando la concentración de la solución inicial, debemos calcular en qué volumen estarán contenidos los 0,0450 moles de HCl:

12,0 moles de HCl \rightarrow 1000 mL de solución concentrada

0,0450 moles de HCl \rightarrow $x = 3,75$ mL de solución concentrada

Se utilizarán 3,75 mL de solución concentrada para preparar la solución diluida.

Entonces, para preparar 150,0 mL de la solución 0,300 M, se deberán tomar 3,75 mL de solución 12 M de HCl y agregar agua hasta completar los 150,0 mL.

Existe un modo más conciso de expresar los cálculos que hemos desarrollado en este apartado y que se fundamenta, del mismo modo, en la **conservación de la cantidad de soluto antes y después de la dilución**. Recordemos que *la cantidad de soluto (masa, moles, equivalentes) antes de la dilución es la misma que después de efectuada la dilución*. Si denominamos 1 a la solución concentrada de partida y 2 a la solución diluida que queremos preparar; C_1 será la concentración (M, N, g/L, etc.) de la solución concentrada y V_1 el volumen necesario de esta solución para preparar la diluida. Del mismo modo, C_2 y V_2 corresponden a la concentración y el volumen de la solución diluida que se quiere obtener.

Cantidad de soluto en la solución concentrada = cantidad de soluto en la solución diluida

$$C_1 \times V_1 = C_2 \times V_2 \quad [7.5]$$

A partir de la ecuación [7.5] es posible despejar el volumen de la solución concentrada que se requiere. El volumen restante de solución diluida se completa con solvente (diluyente). Es importante mencionar que en la ecuación [7.5] ambas concentraciones (C_1 y C_2) y ambos volúmenes (V_1 y V_2) deben expresarse en las mismas unidades.

Otro modo de preparar soluciones en el laboratorio es a partir de solutos sólidos, que se pesan en una balanza y luego se disuelven con el volumen de agua necesario. En este caso, es importante considerar la pureza del reactivo sólido cuando se determina la masa necesaria del mismo para preparar la solución. El concepto de pureza de un reactivo y cómo aplicarlo en cálculos puede consultarse en el capítulo 6.

Para estudiar los procedimientos operativos se recomienda consultar los video-capítulos de preparación de soluciones por dilución y preparación de soluciones a partir del reactivo sólido en el Manual Digital de Laboratorio².

Ejercicio propuesto 7.2. El ácido fosfórico se comercializa típicamente como solución acuosa de concentración 85,0% p/p y densidad 1,69 g/mL. Sus usos van desde el tratamiento de metales para protegerlos de la corrosión hasta la producción de fertilizantes, entre otras aplicaciones. Como fertilizante, se prepara en soluciones entre 72,0 a 75,0% p/v. Si se desean preparar 45,0 L de una solución 73,0% p/v para abonar una quinta, ¿qué volumen del ácido comercial se requiere para tal fin?

² Publicados en <https://www.youtube.com/watch?v=X47a2ezRLmI> y <https://www.youtube.com/watch?v=jVv4RZQ97Iq&t=12s>

Reacciones que ocurren en el seno de una solución

Como se describió en apartados previos, la formación de una solución no implica reacción química, es decir, la naturaleza de los solutos y el solvente no se modifica al combinarse estas sustancias. Sin embargo, es posible que ocurran reacciones químicas entre diferentes solutos en el seno de la solución. En este apartado estudiaremos distintas reacciones que pueden tener lugar cuando se mezclan dos o más soluciones acuosas.

La enorme variedad de reacciones químicas que ocurren en la naturaleza puede clasificarse de acuerdo con sus características. En las **reacciones de combinación**, dos o más sustancias reaccionan para formar un producto. En una **reacción de descomposición** una sustancia sufre una reacción para producir dos o más sustancias distintas. Muchos compuestos se descomponen cuando se calientan.

Las **reacciones de combustión** son reacciones rápidas que producen una flama. En las reacciones de combustión interviene O_2 del aire como uno de los reactivos y se obtienen CO_2 y H_2O como productos. Las **reacciones de oxidación-reducción**, también conocidas como **reacciones redox**, ocurren cuando se transfieren electrones del elemento que se oxida al elemento que se reduce. Por ejemplo, cuando se agrega cinc metálico a un ácido fuerte, se transfieren electrones de los átomos de cinc (que se oxidan) a los iones de hidrógeno del ácido (que se reducen), obteniéndose como productos de reacción $Zn^{2+}(ac)$ y $H_2(g)$. Este tipo de reacciones se estudiarán con profundidad en el capítulo 8. Las reacciones de combustión son un caso particular de reacción redox, donde el $O_2(g)$ es la especie que se reduce a H_2O , oxidando al reactivo que se combustiona.

Reacciones de neutralización

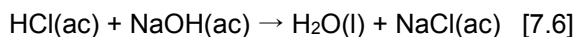
El estudio de las *reacciones de neutralización* requiere de una introducción a los reactivos que participan de ellas, los **ácidos** y las **bases**. Los ácidos se caracterizan por tener un sabor agrio (aquellos que son comestibles), como el ácido cítrico del jugo de limón, y hacen que ciertos tintes cambien de color (el tornasol se vuelve rojo en contacto con los ácidos). Las sustancias básicas o alcalinas, en cambio, tienen sabor amargo y son resbalosas al tacto; el jabón es un buen ejemplo de ello.

El químico sueco Svante Arrhenius (1859–1927) definió a los ácidos como sustancias que producen iones protones (H^+) en agua y a las bases como sustancias que producen iones oxhidrilo (OH^-) en solución acuosa. El concepto de ácidos y bases de Arrhenius puede expresarse del siguiente modo: *los ácidos son sustancias que, al disolverse en agua, aumentan la concentración de iones H^+* . Análogamente, *las bases son sustancias que, al disolverse en agua, aumentan la concentración de iones OH^-* .

Más tarde, los fisicoquímicos Johannes Nicolaus Brønsted (1879-1947) y Thomas Martin Lowry (1874-1936) propusieron definir a los ácidos y bases en términos de su capacidad para transferir protones. Según la teoría de Brønsted-Lowry, *los ácidos son sustancias capaces de*

donar un protón a otra sustancia y las bases aceptan protones. Por ejemplo, cuando se disuelve NH_3 (amoníaco) en agua, actúa como base de Brønsted-Lowry (aceptando un protón del agua) y transformándose en el ion NH_4^+ (amonio), y el H_2O actúa como un ácido de Brønsted-Lowry (dona un protón al NH_3) y se transforma en el ion oxhidrilo, OH^- .

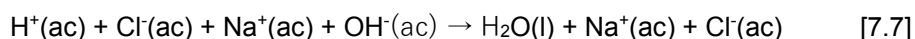
Cuando se combina una solución de un ácido y una solución de una base, ocurre una reacción de **neutralización**. Por ejemplo, al mezclar ácido clorhídrico con una solución de hidróxido de sodio, ocurre la siguiente reacción:



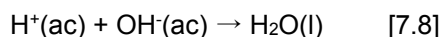
ácido base agua sal

Los productos de una reacción de neutralización son una sal y agua. La sal está formada por el catión proveniente de la base y el anión perteneciente al ácido. En el caso de la ecuación [7.6] la sal producida es NaCl.

La ecuación [7.6] así expresada se conoce como *ecuación molecular balanceada*; si se la escribe en término de los iones resultantes de la disociación del ácido y la base, se obtiene la *ecuación iónica completa*:



Los iones $\text{Na}^+(\text{ac})$ y $\text{Cl}^-(\text{ac})$ que aparecen a ambos lados de la flecha de la ecuación que interpreta la reacción sin ningún cambio, se denominan **iones espectadores**. La *ecuación iónica neta de neutralización* obtenida luego de eliminar los iones espectadores resulta:

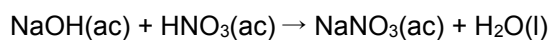


Los iones $\text{H}^+(\text{ac})$ y $\text{OH}^-(\text{ac})$ se combinan para formar $\text{H}_2\text{O(l)}$; *esta es la característica que define a cualquier reacción de neutralización.*

Ejercicio tipo 7.5. Se mezclan 10,0 mL de una solución 0,150 M de NaOH con 20,0 mL de una solución 0,120 M de HNO_3 . Calcúlala concentración de todos los iones presentes en la solución final.

Resolución

En primer lugar, se debe analizar si se produce alguna reacción en el seno de la mezcla; debemos considerar que al combinarse una solución de la base NaOH con una solución del ácido HNO_3 ocurrirá la reacción de neutralización:



En esta reacción, protones y oxhidrilos se neutralizan formando una especie no iónica, el agua. Por lo tanto, se puede afirmar que en la mezcla final estarán presentes todos los iones Na^+ provenientes de la solución de la base y todos los iones NO_3^- de la solución del ácido, pero ¿qué ocurre con los iones H^+ y OH^- ? Para averiguarlo, es necesario verificar si estas especies están presentes en cantidad equimolar, para formar agua, o si alguna de ellas se encuentra en exceso en la mezcla.

Es conveniente iniciar con el cálculo de los moles de protones y oxhidrilos agregados:

1000 mL de solución \rightarrow 0,150 moles de NaOH

10,0 mL de solución \rightarrow $x = 0,0015$ moles de NaOH = 0,0015 moles Na^+ y 0,0015 moles OH^-

1000 mL de solución \rightarrow 0,120 moles de HNO_3

20,0 mL de solución \rightarrow $x = 0,0024$ moles de HNO_3 = 0,0024 moles H^+ y 0,0024 moles NO_3^-

Al plantear la disociación de cada reactivo, se conocen los moles de los iones aportados a la mezcla final. Entre estos iones, los $\text{H}^+(\text{ac})$ y $\text{OH}^-(\text{ac})$ se neutralizarán, pero ¿hasta qué punto procederá esta reacción? Hasta que la ausencia de uno de estos iones la limite. De acuerdo con los cálculos, 0,0015 moles de OH^- se encuentran en defecto (**es el reactivo limitante**) respecto de los 0,0024 moles de H^+ , ya que la estequiometría de la neutralización indica que reaccionan 1 mol OH^- con 1 mol de H^+ . Por lo tanto, en la mezcla final existirán protones que no fueron neutralizados, esto es, que quedaron sin reaccionar:

Moles de H^+ sin reaccionar en la mezcla final = moles de H^+ iniciales – moles de H^+ que reaccionaron con OH^-

Moles de H^+ sin reaccionar en la mezcla final = 0,0024 moles - 0,0015 moles

Moles de H^+ sin reaccionar en la mezcla final = 0,0009 moles de H^+

Para conocer su molaridad se debe tener en cuenta que el volumen de la mezcla final es la suma de los volúmenes de cada una de las soluciones adicionadas:

$$V_{\text{final}} = 10,0 \text{ mL} + 20,0 \text{ mL} = 30,0 \text{ mL}$$

30,0 mL de solución final \rightarrow 0,0009 moles de H^+

1000 mL de solución final \rightarrow $x = 0,03$ moles de H^+ **La solución final es 0,03 M en H^+**

Por último, se debe calcular la concentración de los iones no involucrados en la neutralización, los iones espectadores, que están presentes en la mezcla final:

30,0 mL de solución final → 0,0015 moles de Na^+

1000 mL de solución final → $x = 0,050$ moles de Na^+ **La solución final es 0,050 M en Na^+**

30,0 mL de solución final → 0,0024 moles de NO_3^-

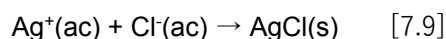
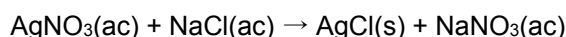
1000 mL de solución final → $x = 0,080$ moles de NO_3^- **La solución final es 0,080 M en NO_3^-**

A partir de los cálculos podemos concluir que, como producto de la mezcla de las soluciones, la concentración final de los iones espectadores es menor a la de partida. El reactivo limitante, OH^- , se consumió totalmente y quedaron H^+ sin reaccionar que se encontraban en exceso.

Reacciones con formación de precipitado

Existe un tipo de reacciones de combinación que da por resultado la formación de un **producto insoluble** y se denominan **reacciones de precipitación**. Un **precipitado** es un **sólido iónico insoluble**, que se forma en el seno de la solución para luego separarse y, generalmente, depositarse en el fondo del recipiente. Este sólido conforma una nueva fase del sistema, que ahora está formado por una **fase líquida** de solución acuosa en equilibrio con una **fase sólida** producto de la precipitación.

Una reacción de precipitación muy conocida es la que ocurre cuando se mezclan soluciones de AgNO_3 y de NaCl de concentraciones adecuadas, con formación de un precipitado blanco de AgCl :



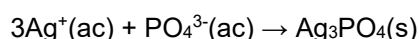
ion ion precipitado

Los iones $\text{NO}_3^-(\text{ac})$ y $\text{Na}^+(\text{ac})$ son los iones espectadores de esta reacción y permanecen en solución, por lo que no aparecen consignados en la *ecuación neta de precipitación* [7.9]. Es importante mencionar que, de acuerdo con el alcance de este libro, estamos considerando que la reacción de precipitación es completa. Desde una perspectiva más detallada, los sólidos insolubles (poco solubles), participan de un equilibrio donde una pequeña cantidad de los iones permanece en la solución.

Ejercicio tipo 7.6. Se mezclan 220 mL de una solución 0,115 M de AgNO_3 con 180 mL de una solución 1,60% p/v de K_3PO_4 , con formación del precipitado Ag_3PO_4 . ¿Qué masa de precipitado se forma? ¿Cuáles son las concentraciones de los iones que permanecen en solución?

Resolución

Comenzamos por plantear la reacción neta de precipitación:



En principio, es necesario averiguar si los iones plata y fosfato reaccionan en forma estequiométrica o si alguno de ellos limita la reacción:

1000 mL de solución → 0,115 moles de AgNO_3

220 mL de solución → $x = 0,0253$ moles de $\text{AgNO}_3 = 0,0253$ moles Ag^+ y $0,0253$ moles NO_3^-

100 mL de solución → 1,60 g de K_3PO_4

180 mL de solución → $x = 2,88$ g de K_3PO_4

En el caso de la solución de K_3PO_4 , se debe primero calcular la cantidad de moles de sal aportados, considerando su masa molar (212 g/mol), y luego contemplar que por cada mol de sal disociada se producen 3 moles de ion potasio y 1 mol de ion fosfato:

212 g de $\text{K}_3\text{PO}_4 \rightarrow 1$ mol de K_3PO_4

2,88 g de $\text{K}_3\text{PO}_4 \rightarrow x = 0,0136$ moles de $\text{K}_3\text{PO}_4 = 0,0408$ moles K^+ y $0,0136$ moles PO_4^{3-}

De acuerdo con la estequiometría de la reacción de precipitación, 1 mol de ion fosfato reacciona con 3 moles de iones plata, por lo tanto:

1 mol de $\text{PO}_4^{3-} \rightarrow 3$ moles de Ag^+

$0,0136$ moles de $\text{PO}_4^{3-} \rightarrow x = 0,0408$ moles de Ag^+

De acuerdo con este cálculo, 0,048 moles de Ag^+ son necesarios para que reaccione la totalidad de los iones PO_4^{3-} . Sin embargo, se dispone de 0,0253 moles de Ag^+ , siendo este catión el reactivo limitante, que formará parte del sólido precipitado y no estará presente en la solución final. Por otro lado, un remanente de iones fosfato, que no formaron parte del precipitado, permanecerán en la solución.

Para calcular la masa de precipitado Ag_3PO_4 que se formará, se debe considerar al reactivo limitante:

3 moles de $\text{Ag}^+ \rightarrow 1$ mol de Ag_3PO_4

$0,0253$ moles de $\text{Ag}^+ \rightarrow x = 0,00843$ moles de Ag_3PO_4

Teniendo en cuenta que la masa molar de Ag_3PO_4 es 419 g/mol, precipitan 3,53 g de Ag_3PO_4 .

La concentración de los iones en la solución final se debe calcular considerando el volumen total:

$$V_{\text{final}} = 220 \text{ mL} + 180 \text{ mL} = 400 \text{ mL}$$

En el caso de los iones espectadores, el cálculo es directo:

400 mL de solución final → $0,0253$ moles de NO_3^-

1000 mL de solución final → $x = 0,0633$ moles NO_3^- **La solución final es $0,0633 \text{ M}$ en NO_3^-**

400 mL de solución final → 0,0408 moles K^+

1000 mL de solución final → $x = 0,190$ moles de K^+ **La solución final es 0,190 M en K^+**

Para calcular los iones fosfato en exceso que permanecen en solución se debe calcular la diferencia entre los moles iniciales agregados y los moles que precipitaron:

3 moles de Ag^+ → 1 mol de PO_4^{3-}

0,0253 moles de Ag^+ → $x = 0,00843$ moles de PO_4^{3-} (moles que precipitaron)

Moles de PO_4^{3-} sin reaccionar = moles de PO_4^{3-} iniciales – moles de PO_4^{3-} que reaccionaron con Ag^+ para formar el precipitado

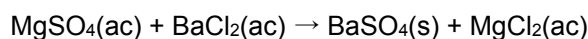
Moles de PO_4^{3-} sin reaccionar = 0,0136 moles PO_4^{3-} – 0,00843 moles de PO_4^{3-}

Moles de PO_4^{3-} sin reaccionar = = 0,00517 moles de PO_4^{3-} (permanecen en la solución)

400 mL de solución final → 0,00517 moles de PO_4^{3-}

1000 mL de solución final → $x = 0,0129$ moles PO_4^{3-} **La solución final es 0,0129 M en PO_4^{3-}**

Ejercicio propuesto 7.3. El contenido en sulfatos de las aguas naturales es muy variable y tienen su origen en cursos que atraviesen terrenos ricos en yesos o en la contaminación con aguas residuales industriales. Los sulfatos no suelen ser un problema central en la potabilidad, pero, en ocasiones, contenidos superiores a 300 mg/L pueden ocasionar trastornos gastrointestinales en los niños. Para analizar el contenido de sulfatos en agua se utiliza el método gravimétrico, mediante precipitación con cloruro de bario, que resulta muy preciso y aplicable a concentraciones superiores a 10 mg/L. El sulfato de bario precipita de acuerdo con la siguiente reacción, se seca a 110 °C y calcina a 600 °C, para luego determinar su peso:



Una muestra de agua de 250,0 mL fue tratada con exceso de $BaCl_2$. El precipitado seco y calcinado arrojó un peso de 12,3576 g ¿Qué concentración molar de $MgSO_4$ tiene la muestra de agua analizada? ¿es apta para consumo humano?

En el siguiente apartado se describe cómo las reacciones que ocurren en el seno de una solución acuosa pueden ser empleadas en un procedimiento que permite determinar la concentración desconocida de una solución.

Determinación de la concentración de una solución: método de titulación

En ocasiones se cuenta con muestras ambientales, médicas, de preparaciones en el laboratorio o de otros orígenes que son soluciones acuosas cuya concentración se desconoce y se requiere determinar. Uno de los métodos analíticos clásicos para cuantificar la cantidad de un soluto presente en un cierto volumen de la solución se denomina **titulación** o **valoración**. Debido a que las medidas de volumen desempeñan un papel fundamental en las titulaciones, se les conoce también como **análisis volumétrico**, y al conjunto de estas técnicas se las denomina **volumetrías**.

Tales técnicas se basan en la utilización de una solución de concentración conocida con suficiente grado de precisión, denominada **titulante**, que se agrega de forma cuantitativa a un cierto volumen de la solución de concentración desconocida o **solución problema**, medido previamente con precisión. El titulante reacciona con el soluto presente en la solución problema, denominado **analito**, bajo una **estequiometría conocida**. La **reacción de titulación** se diseña de forma tal que su **punto final** sea fácilmente visualizable en las condiciones de trabajo del laboratorio y coincida o se acerque lo máximo posible al punto de equivalencia. El **punto de equivalencia** es el momento de la titulación en el que se ha adicionado la cantidad de titulante necesaria para reaccionar *estequiométricamente* con el analito, sin que exista exceso de alguno de ellos en la mezcla final. En el punto de equivalencia, los equivalentes de titulante son iguales a los de analito. En el *punto final*, definido experimentalmente de acuerdo con la reacción de titulación, ocurrirá un cambio en las propiedades de la mezcla resultante (en su color, su potencial eléctrico, su conductividad, en la formación de un precipitado u otro) que indicará que es momento de detener el agregado de titulante. De este modo, podemos concluir que *el punto de equivalencia es un valor teórico y el punto final una cantidad experimental*. De ahí, la importancia de la elección de una visualización del punto final adecuada, esto es, cuya visualización sea lo más indicativa posible del punto de equivalencia.

Para realizar este análisis se requiere un equipo como el que se muestra en la figura 7.2, que consta de un soporte metálico con una pinza de mariposa adosada, un embudo pequeño, una bureta y un frasco Erlenmeyer. El elemento volumétrico calibrado de este conjunto es la bureta, en la que se pueden distinguir un cuerpo graduado (generalmente hasta la décima de mL), un robinete o llave y un vástago. La bureta es un instrumento de descarga, por lo que su graduación se encuentra invertida respecto de la graduación de otros elementos volumétricos, como la pipeta o la probeta, con el cero de la escala (0,00 mL) en la parte superior.

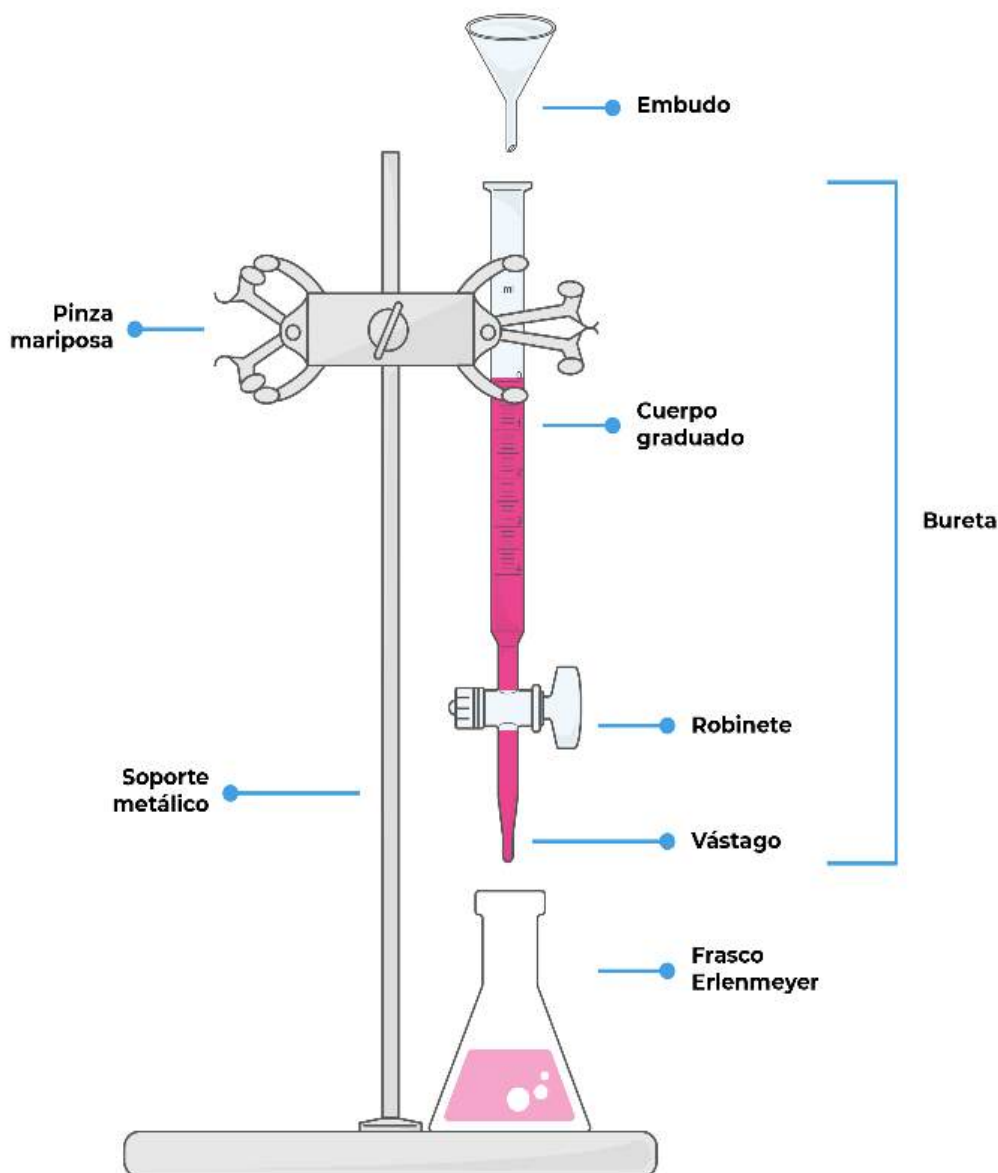


Figura. 7.2. Equipo de titulación.

Previo a la operación de titulación se debe preparar el equipo. Se lava la cara interna de una bureta limpia y seca con la solución titulante. Una vez lavada, se procede a su llenado (utilizando un embudo) con solución titulante, procurando que no queden burbujas de aire en la columna de líquido. En este momento, se abre el robinete para verificar que no haya pérdidas de titulante y se llena el vástago. Luego, con el robinete cerrado, se completa el volumen y se enrasa la bureta en 0,00 mL. A continuación, se describe una titulación en términos generales. Ciertas valoraciones tienen pasos adicionales que se detallan en sus protocolos específicos.

Se toma con pipeta aforada un determinado volumen de la solución problema (denominado **alícuota**) y se la coloca en un frasco Erlenmeyer limpio y seco. Si la reacción de titulación no presenta por sí misma un cambio que permita visualizar el punto final, será necesario agregar

unas gotas de un indicador para este fin. Si el volumen de la alícuota fuera pequeño y se dificultara la observación del punto final de la titulación, puede adicionarse agua destilada (recordemos que nos enfocamos en soluciones acuosas). Es importante destacar que la adición de agua destilada facilitará la visualización de los cambios que se producen en el Erlenmeyer sin modificar el número de moles del soluto a cuantificar.

A continuación, se procede a la valoración, agregando el titulante gota a gota desde la bureta y agitando permanentemente el Erlenmeyer para homogeneizar su contenido. Es importante estudiar la correcta toma del robinete al realizar esta operación, descrita en detalle en el *Manual Digital de Laboratorio*³. La adición de titulante continúa hasta observar un cambio en el frasco Erlenmeyer, que en general se trata de un cambio de color cuando realizamos titulaciones entre ácidos y bases, y que corresponde al punto final. En ese momento, se cierra la bureta y se registra el volumen de titulante consumido, que debe consignarse con la precisión del instrumento y evitando el error de paralaje en la lectura.

A partir del volumen gastado en la titulación y conociendo el **título** o concentración de la solución titulante, se pueden calcular los moles o equivalentes utilizados para titular la muestra. A modo de ejemplo: se desea conocer la concentración de una solución problema a partir de una solución de titulante de concentración 0,1200 N. Para ello se toma una alícuota de 10,00 mL de la solución de concentración desconocida y se procede a la titulación, registrando en el punto final un consumo de solución titulante de 15,00 mL. Para averiguar la concentración de la solución problema debemos realizar los siguientes cálculos:

1000 mL de solución titulante → 0,1200 equivalentes de soluto titulante

15,00 mL de solución titulante → $x = 0,001800$ equivalentes de soluto titulante

Como la cantidad de equivalentes consumidos de titulante es igual a la cantidad de equivalentes del soluto presentes en la alícuota valorada, es posible calcular la concentración normal de la solución problema:

10,00 mL de solución problema → 0,001800 equivalente de analito

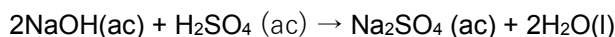
1000 mL de solución problema → $x = 0,1800$ equivalente de analito

La solución problema es 0,1800 N

Si la concentración de la solución titulante se conociera en términos de **molaridad** es posible relacionar la cantidad de moles de titulante consumidos con la cantidad de moles de soluto problema presentes en la alícuota valorada, a través de la **estequiometría de la reacción de titulación**.

³ Video capítulo Titulación, accesible en <https://www.youtube.com/watch?v=r1WHgHtmnEw&t=10s>

Ejercicio tipo 7.6. Se titulan 10,00 mL de una solución de NaOH con una solución 0,1520 M de H₂SO₄. La reacción de titulación es la siguiente:



Si se consumieron 19,00 mL del titulante, ¿cuál es la concentración molar de la solución de NaOH?

Resolución

De acuerdo con la estequiometría de la reacción de titulación, por cada 2 moles del soluto NaOH titulado se consume 1 mol de H₂SO₄ titulante. Considerando los 19,00 mL de titulante consumidos:

1000 mL de solución titulante → 0,1520 moles de H₂SO₄

19,00 mL de solución titulante → x = 0,002888 moles de H₂SO₄

De este modo, 0,002888 moles de H₂SO₄ reaccionan estequiométricamente con NaOH:

1 mol de H₂SO₄ → 2 moles de NaOH

0,002888 moles de H₂SO₄ → x = 0,005776 moles de NaOH

Consumiendo 0,005776 moles de NaOH (presentes en la alícuota de 10,00 mL).

Finalmente, se refiere a 1 L para conocer la molaridad de la solución problema:

10,00 mL de solución problema → 0,005776 moles de NaOH

1000 mL de solución de solución problema → x = **0,5776 moles de NaOH**

La solución de NaOH cuya concentración se deseaba determinar es 0,5776 M.

Debemos recordar que las especies que reaccionan en una neutralización son los H⁺ y OH⁻, por lo que la determinación de la concentración de NaOH podría realizarse también calculando cuántos moles de H⁺ se agregaron desde la bureta (cada mol de H₂SO₄ aporta 2 moles de H⁺), que serán los mismos que los moles de OH⁻ titulados (estequiometría 1 a 1), para luego calcular los moles de NaOH, que en este caso coincidirán con los de OH⁻, tal como se infiere de la fórmula química de esta base.

Toda titulación debe realizarse al menos por duplicado. La concentración de la solución determinada por este procedimiento se calcula como el promedio de las concentraciones halladas en cada réplica del ensayo:

$$C_{\text{muestra}} = \frac{C_{\text{réplica 1}} + C_{\text{réplica 2}}}{2}$$

Ejercicio propuesto 7.4. En referencia al ejercicio tipo 7.6, ¿qué iones se encuentran en el frasco Erlenmeyer al finalizar la titulación? ¿Cuáles son sus concentraciones molares, normales y en g/L?

Ejercicio propuesto 7.5. La siguiente tabla recoge la información presentada en la etiqueta de una botella de un agua mineral natural.

Composición química en [mg/L]

BICARBONATOS	297,2
SULFATOS	43,9
CLORUROS	35,8
CALCIO	88,7
MAGNESIO	23,4
SODIO	18,6

- Escribí las fórmulas de todos los iones presentes.
- Indicá cuál es el solvente y alguno de los solutos presentes en un agua mineral.
- Calculá la concentración de cada uno de los iones en las siguientes unidades % p/v, % p/p, M, N ¿Necesitás alguna información adicional para realizar alguno de los cálculos?

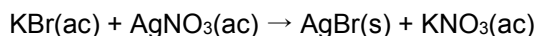
Problema propuesto 7.6. Se hacen reaccionar 250 mL de una solución 0,150 N de ácido sulfúrico con 200 mL de una solución 0,100 M de hidróxido de potasio. Escribí la ecuación molecular balanceada, la ecuación iónica completa y la ecuación iónica neta. Calculá la concentración de todos los iones en la solución final.

Problema propuesto 7.7.

- Se preparan 50 mL de una solución acuosa, denominada *solución 1*, pesando 2,5 g de sulfato de cobre (II) y llevándolo a volumen en un recipiente adecuado. La solución tiene un color azul similar al de la figura 7.1 ¿Cuál es su concentración molar?
- Si se toman 10 mL de la *solución 1* y se agrega agua hasta obtener 50 mL de una nueva solución (*solución 2*) ¿Cómo se denomina esta operación? Si comparas las soluciones 1 y 2, ¿qué observas a simple vista? ¿Cómo será la concentración de la solución 2 respecto a la de la 1? ¿Cuántos moles de la sal hay en 10 mL de la *solución 1*? ¿Cuántos moles de sal hay en la totalidad de la *solución 2*? Calculá la concentración de la *solución 2*.
- Se mezclan 10 mL de la *solución 1* con 20 mL de la *solución 2*. Esta nueva solución se denomina *solución 3*. Si comparas a simple vista todas las soluciones, observando la intensidad del color de cada una de ellas, ¿podrías ordenarlas según su concentración creciente? Calculá la concentración molar de la *solución 3*.

Ejercicio propuesto 7.8. La determinación de bromuros en alimentos es de utilidad como control del uso de bromato de potasio (masa molar: 167 g/mol), compuesto que se utilizaba como mejorador de harinas en el proceso de panificación. Si bien en la actualidad su uso se encuentra prohibido, se han reportado episodios de intoxicación, por lo que el análisis en muestras de harina se lleva a cabo para detectar o descartar la adición clandestina de bromato.

Se realizó una volumetría de precipitación de bromuro con AgNO_3 sobre 3 muestras de harina, que fueron preparadas dispersando 100,0 g de harina en 500,0 mL de agua. La reacción de titulación es la siguiente:



Se titularon 100,0 mL de las muestras con AgNO_3 0,005 M. Las valoraciones arrojaron los siguientes volúmenes de titulante consumido:

Harina A: 1,20 mL

Harina B: 1,08 mL

Harina C: 1,25 mL

Si el límite de detección de bromato de potasio establecido por ley es de 50 miligramos por kilogramo de harina (50 ppm), y sabiendo que un mol de bromuro titulado equivale a un mol de bromato de potasio en la muestra original de harina, determinar cuál harina es apta para consumo y cuál debería retirarse del mercado.

Respuestas de los ejercicios propuestos

Ejercicio propuesto 7.1.

NaNO_2 : 0,280 M = 0,280 N = 19,3 g/L = 1,88% p/p = 0,277 m

MgCl_2 : 3,53 M = 7,05 N = 332 g/L = 25,5% p/p = 3,64 m

K_3PO_4 : 0,507 M = 1,52 N = 108 g/L = 9,95% p/p = 0,520 m

FeSO_4 : 0,720 M = 1,43 N = 109 g/L = 10,1% p/p = 0,741 m

Ejercicio propuesto 7.2.

Se requieren 22,9 L de ácido comercial.

Ejercicio propuesto 7.3.

La muestra de agua es 0,212 M en sulfato de magnesio y no es apta para consumo.

Ejercicio propuesto 7.4.

Al final de la titillation se encuentran en el frasco Erlenmeyer los iones Na^+ y SO_4^{2-} .

Na^+ : 0,1992 M = 0,1992 N = 4,581 g/L

SO_4^{2-} : 0,09957 M = 0,1992 N = 9,560 g/L

Ejercicio propuesto 7.5.

a) HCO_3^- (0,02972% p/V = 0,004872 M = 0,004872 N)

SO_4^{2-} (0,00439% p/V = 0,000457 M = 0,000915 N)

Cl^- (0,00358% p/V = 0,00101 M = 0,00101 N)

Ca^{2+} (0,00887% p/V = 0,00222 M = 0,00444 N)

Mg^{2+} (0,00234% p/V = 0,000963 M = 0,00193 N)

Na^+ (0,00186% p/V = 0,000809 M = 0,000809 N)

b) El solvente es agua, los solutos son los mencionados en a). Para poder calcular el % p/p, es necesario conocer la densidad del agua mineral. Si se presume una densidad aproximada de 1 g/mL, resulta que % p/p \cong % p/V.

Ejercicio propuesto 7.6.

a) $\text{H}_2\text{SO}_4 + 2\text{KOH} \rightarrow \text{K}_2\text{SO}_4 + 2\text{H}_2\text{O}$ ecuación molecular balanceada

$2\text{H}^+ + \text{SO}_4^{2-} + 2\text{K}^+ + 2\text{OH}^- \rightarrow 2\text{K}^+ + \text{SO}_4^{2-} + 2\text{H}_2\text{O}$ ecuación iónica completa

$\text{H}^+ + \text{OH}^- \rightarrow \text{H}_2\text{O}$ ecuación iónica neta

b) En la solución final hay iones K^+ (0,0444 N), SO_4^{2-} (0,0833 N) y H^+ (0,0389 N).

Ejercicio propuesto 7.7.

a) La solución 1 es 0,31 M.

b) La operación se denomina dilución. La concentración de la solución 2 es menor que la de la 1, lo que se evidencia por una menor intensidad en el color azul. En 10 mL de solución 1 hay los mismos moles que en 50 mL de solución de, esto es, 0,0031 moles de sulfato de cobre (II). La solución 2 es 0,063 M.

c) Observando la intensidad del color de las soluciones podrá evidenciarse que la concentración de la solución 2 (0,063 M) es menor que la de la solución 3 (0,15 M) y ésta a su vez es menor que la concentración de la solución 1 (0,31 M). La solución 3 es 0,15 M.

Ejercicio propuesto 7.8.

Las harinas A y C deberían retirarse del mercado; la harina B es apta para consumo.

Referencias

Canal Laura Briand. (20 de Marzo de 2017). Manual Digital de Laboratorio [Archivo de Vídeo].

Youtube. <https://www.youtube.com/watch?v=X47a2ezRLmM>

Canal Laura Briand. (7 de Mayo de 2017). Manual Digital de Laboratorio [Archivo de Vídeo].

Youtube. <https://www.youtube.com/watch?v=jVv4RZQ97Iq&t=12s>

Canal Laura Briand. (7 de Mayo de 2017). Manual Digital de Laboratorio [Archivo de Vídeo].

Youtube. <https://www.youtube.com/watch?v=r1WHgHtmnEw&t=10s>

Cingolani, H. E., & Houssay, A. A. (2014). *Fisiología Humana de Houssay: Dirigido por Horacio E. Cingolani y Alberto A. Houssay* (7a. ed.). Buenos Aires: El Ateneo.

Nelson, D. L., Cuchillo Foix, C. M., Lehninger, A. L., & Cox, M. M. (2005). *Lehninger: Principios de Bioquímica* (4a. ed.). Barcelona: Omega.

CAPÍTULO 8

Reacciones de oxidación-reducción

Virginia Vetere

En este capítulo nos proponemos identificar reacciones químicas donde ocurren transferencia de electrones entre los reactivos, denominadas reacciones de oxidación-reducción. Diferenciaremos los procesos conocidos como oxidación y reducción. Presentaremos algunos agentes oxidantes y reductores de uso común en los laboratorios de análisis químicos.

Aplicaremos un método para el balanceo de ecuaciones que interpretan reacciones químicas con transferencia de electrones. Este método se conoce como del ion-electrón (su nombre nos dará una clave para aplicarlo).

Por último, emplearemos la información provista por la ecuación química para la resolución de algunos ejercicios de importancia práctica.

Lectura inicial

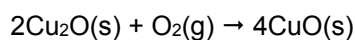
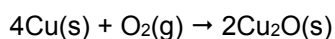
La cúpula del Congreso de la Nación Argentina

El Palacio del Congreso de la Nación Argentina, sede del Poder Legislativo, se encuentra en la Ciudad de Buenos Aires. Este imponente edificio ha sido testigo a lo largo del tiempo, de la lucha de lxs ciudadanxs, que se manifestaron frente a sus puertas por la promulgación de leyes que ampliaran los derechos de lxs argentinxs. El edificio fue inaugurado en 1906, aún sin finalizar su construcción, y terminado en 1946. Es de estilo ecléctico grecorromano y posee una majestuosa cúpula de 80 metros de altura, revestida en cobre, de un color verde muy característico (Congreso de la Nación Argentina, 2021).

El cobre es un metal que, seguramente, has visto en adornos, utensilios y en los cables que conducen la electricidad. Habrás notado su particular color rojizo y su brillo. En este punto, probablemente te preguntes por qué la cúpula del emblemático edificio del Congreso posee un color verdoso.

El cobre, en contacto con la atmósfera, participa de una serie de reacciones químicas que conducen a su oxidación. Durante este proceso el Cu metálico se transforma en sustancias que

contienen Cu^+ y Cu^{2+} . A continuación, se muestran las reacciones de formación de los compuestos de Cu^{2+} que dan el característico color verde a las piezas de cobre oxidadas, y cuya composición puede variar de acuerdo con el ambiente y el tiempo de exposición:



Si el aire está contaminado con azufre, debido por ejemplo a la quema de combustibles fósiles, puede formarse CuS . Con el paso del tiempo el CuO y el CuS reaccionan lentamente con el dióxido de carbono y el agua presentes en la atmósfera para formar $\text{Cu}_2\text{CO}_3(\text{OH})_2$; $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$; $\text{Cu}_3\text{SO}_4(\text{OH})_4$ y/o $\text{Cu}_4\text{SO}_4(\text{OH})_6$ que dan el color verdoso característico que recubre a las piezas de cobre (Leygraf y col, 2019; Copper Development Association, 2021).

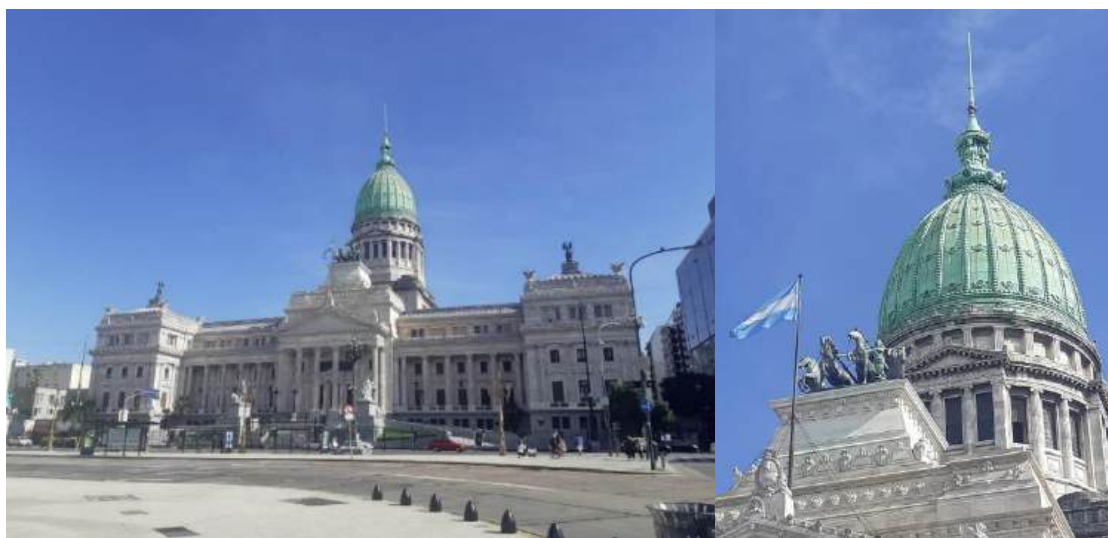


Figura 8.1. Fotos del Palacio del Congreso de la Nación. Ciudad de Buenos Aires, Argentina.

Si bien la comprensión de las reacciones que conducen a la formación de estos compuestos está fuera del alcance de este libro, podemos hacer algunas observaciones generales que nos servirán como punto de partida para lo que estudiaremos en este capítulo. El cobre, originalmente con número de oxidación 0, se transforma en compuestos que contienen el catión Cu^{2+} , perdiendo dos electrones por cada átomo metálico. Este proceso se denomina **oxidación** y se dice que el cobre se ha oxidado. Para que el proceso de oxidación ocurra debe estar presente alguna sustancia capaz de ganar los electrones perdidos por el cobre, en este caso es el O_2 atmosférico. De forma simplificada, el O_2 se transforma en ion óxido, cambiando el número de oxidación del elemento de 0 a -2. Un proceso como este, en el que una sustancia gana electrones, disminuyendo su número de oxidación, se denomina **reducción**, y diremos entonces que el O_2 se redujo.

Este tipo de procesos químicos, donde existe transferencia de electrones entre las sustancias participantes, se denominan **reacciones de oxidación-reducción** y su estudio será el objetivo del presente capítulo.

Reacciones de oxidación-reducción

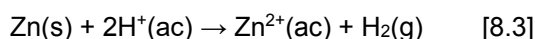
Las **reacciones de oxidación-reducción (o redox)**, son aquellas en las que ocurre transferencia de electrones entre los reactivos y, por lo tanto, los átomos de algunos de los elementos de las sustancias intervinientes cambian sus números de oxidación. En las reacciones de este tipo, habrá átomos que, como consecuencia de la pérdida de electrones, aumentarán su número de oxidación, y otros que, por ganancia de electrones, disminuirán su número de oxidación. La pérdida de electrones por parte de una sustancia se denomina **OXIDACIÓN**, y la ganancia de electrones se denomina **REDUCCIÓN**. Un gran número de reacciones químicas, como la corrosión, la combustión, la extracción de algunos metales a partir de sus minerales, el metabolismo de los alimentos que ingerimos, la fotosíntesis, entre otras, son reacciones *redox*.

¿Cómo podemos identificar una reacción de oxidación-reducción? Observemos el siguiente par de ecuaciones que interpretan dos reacciones químicas, donde interviene el ácido clorhídrico:



La ecuación [8.1] representa una reacción de intercambio de iones, en este caso es una precipitación con formación de la sal, poco soluble en agua, AgCl (precipitado). Podemos observar que todas las especies intervinientes conservan su número de oxidación antes y después de la reacción química y, por lo tanto, no hay transferencia de electrones entre ellas.

La segunda reacción, representada por la ecuación [8.2], corresponde a la oxidación de Zn, que se transforma en Zn^{2+} , y a la reducción de H^+ para formar H_2 . De este modo, el número de oxidación del cinc ha aumentado de 0 en los reactivos a +2 en los productos (se ha oxidado) y el del hidrógeno ha disminuido de +1 en los reactivos a 0 en los productos (se ha reducido). El número de oxidación del ion Cl^- permanece como -1, siendo un ion espectador, esto es, que no participa directamente del proceso de oxidación-reducción. De este modo, podemos escribir la ecuación iónica neta como:



La reacción de oxidación del cinc por los cationes H^+ , puede interpretarse en términos de dos **semirreacciones** (o medias reacciones), la de oxidación de Zn y la de reducción de H^+ :



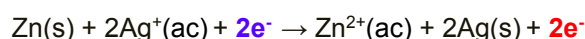
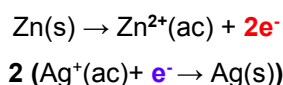
En la semirreacción de oxidación, donde se produce una pérdida de electrones, estos se muestran del lado de los productos (en color rojo). Para la semirreacción de reducción, los electrones ganados aparecen junto a los reactivos (en color azul).

Es importante tener en cuenta que, un proceso de reducción implica simultáneamente un proceso equivalente de oxidación. Así, el número de electrones ganados por un átomo debe ser igual al número de electrones perdidos por otro átomo en el mismo **proceso total**. Esto puede observarse en las ecuaciones [8.4] y [8.5] donde se pierden 2 electrones por cada átomo de Zn que se oxida y se ganan 2 electrones por cada dos iones H^+ , que se reducen para formar H_2 .

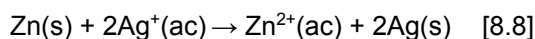
Consideremos un ejemplo más, la oxidación de Zn producida, en este caso, por el catión Ag^+ . Para este proceso las medias reacciones de oxidación y de reducción serán:



Con el fin de que aparezca igual número de electrones a ambos lados de la ecuación (recordá que el número de electrones ganados y perdidos en el proceso total debe ser el mismo), la semirreacción [8.7] debe ser multiplicada por 2:



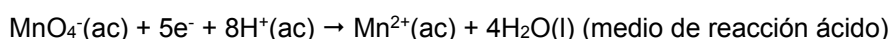
De este modo, al sumar las semirreacciones se cancelan los electrones a cada lado y la ecuación global de oxidación-reducción queda representada por:



Agentes oxidantes y reductores

Se denomina **oxidante**, o **agente oxidante** a una sustancia que promueve la oxidación de otras sustancias sustrayéndoles electrones. El agente oxidante se reduce, ya que contiene al elemento cuyo número de oxidación disminuye. Algunas sustancias como MnO_4^- (anión permanganato) o $Cr_2O_7^{2-}$ (anión dicromato) son agentes oxidantes comunes empleados en los laboratorios de química. En las figuras 8.2 y 8.3 se muestran las sales $KMnO_4$ y $K_2Cr_2O_7$ y sus correspondientes soluciones acuosas, que presentan colores muy característicos. Estas sustancias son oxidantes fuertes ya que poseen elementos en su máximo número de oxidación.

Las semirreacciones de reducción en las que participan estos agentes oxidantes, cuya forma de balancear estudiaremos en el siguiente apartado, se muestran a continuación. Es importante notar que, en algunos casos, el producto obtenido depende del medio en el que ocurra la reacción. En este sentido, en las siguientes ecuaciones puede observarse que el ion MnO_4^- , se reduce a Mn^{2+} en medio ácido y a MnO_2 en medio básico.



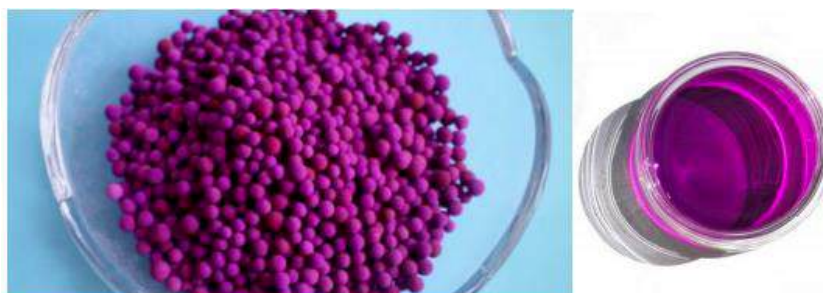
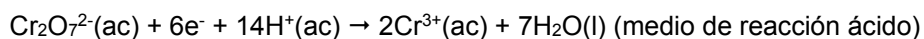
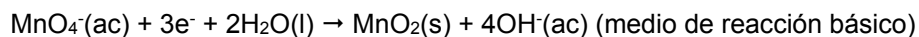


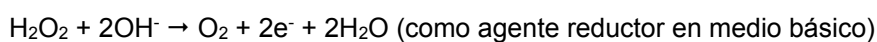
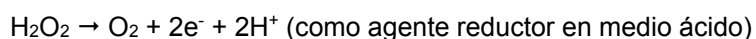
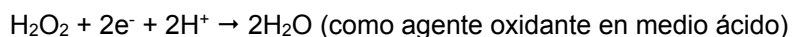
Figura 8.2. Sal de KMnO_4 (izquierda) y su solución acuosa (derecha).



Figura 8.3. Sal de $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ (izquierda) y su solución acuosa (derecha).

Un **reductor**, o **agente reductor** es una sustancia capaz de provocar la reducción de otras, proveyéndoles electrones. El agente reductor se oxida, ya que contiene al elemento cuyo número de oxidación aumenta. Algunos agentes reductores usados en los laboratorios e industrias químicas son hidruros, CO, C, P, S, metales (Al, Mg, Ti, Zr, entre otros), H_2 , etc.

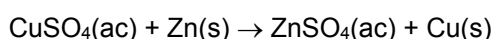
Ciertas sustancias como el peróxido de hidrógeno, H_2O_2 , pueden actuar como agentes oxidantes o reductores. En el H_2O_2 el número de oxidación del oxígeno es -1. Sin embargo, este elemento puede presentarse también con los números de oxidación 0 y -2. De este modo, tiene la posibilidad de reducirse u oxidarse, dependiendo la sustancia con la que reaccione. A continuación, se muestran las semirreacciones de oxidación y reducción para H_2O_2 :



Retomemos al ejemplo de la ecuación [8.3]. En este caso el Zn es el agente reductor (provoca la reducción de H^+ a H_2 y se oxida a Zn^{2+}), en tanto que, el H^+ es el agente oxidante (promueve la oxidación de Zn a Zn^{2+} , reduciéndose a H_2). Para la reacción representada por la ecuación [8.8] el Zn es el agente reductor y el catión Ag^+ el agente oxidante.

Probablemente te preguntes cómo saber si una sustancia actuará como agente oxidante o reductor frente a otra. Existen tablas que nos permiten predecir la capacidad oxidante o reductora de una sustancia, que se construyen comparando su tendencia a reducirse frente a otra tomada como referencia. Estas tablas se denominan *tablas de potencial de reducción estándar*. El abordaje de este tema excede los alcances de este libro.

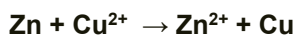
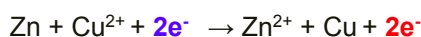
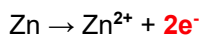
Ejercicio tipo 8.1. Indicá si la siguiente reacción es de oxidación-reducción. En caso afirmativo, escribí las semirreacciones y mencioná cuál es el agente oxidante y cuál el agente reductor.



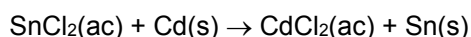
Resolución: cada estudiante podrá encontrar la estrategia que considere más apropiada para resolver el ejercicio, a continuación, te proponemos una.

Si observamos el número de oxidación de cada elemento notaremos que para el cobre este cambia de +2 a 0 durante la reacción, mientras que el cinc lo hace de 0 a +2. De este modo, el Cu^{2+} se reduce a Cu por ganancia de dos electrones, siendo por tanto el agente oxidante. En el mismo proceso global, el Zn se oxida a Zn^{2+} , perdiendo electrones, y constituyéndose como agente reductor. El anión sulfato es, en este caso, un ion espectador y no participa de la reacción de oxidación-reducción.

Las semirreacciones y la ecuación iónica global se muestran a continuación:



Ejercicio propuesto 8.1. Para la reacción que se indica a continuación escribí las semirreacciones de oxidación y de reducción y determiná el agente oxidante y el agente reductor. ¿Hay iones que no se oxidan ni se reducen? ¿Cómo expresarías la ecuación iónica global?



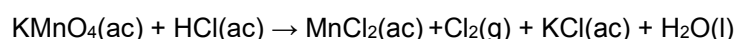
Balanceo de ecuaciones de oxidación-reducción

Como hemos estudiado en el capítulo 6, el balanceo de una ecuación química se basa en el principio de conservación de la masa, por lo tanto, la cantidad de cada elemento debe ser la misma a ambos lados de la ecuación. En el caso de las reacciones *redox*, debemos recordar

además que, en el proceso global, el número de electrones que se pierden en la oxidación deber ser igual al número de electrones que se ganan en la reducción.

Hasta el momento hemos analizado reacciones químicas que se pueden equilibrar de forma relativamente sencilla, como las ecuaciones [8.3] y [8.8]. Sin embargo, para algunos procesos de oxidación-reducción esta tarea puede resultar más compleja. A continuación, describiremos un método sistemático para el balanceo de ecuaciones *redox* denominado del **ion-electrón** o de las **medias reacciones**. Este método es aplicable para reacciones que ocurren en medio acuoso y en las que mayoritariamente intervienen iones. En algunos textos podés encontrar variantes del método que se diferencian principalmente en el orden de los pasos a seguir. En este capítulo presentamos una secuencia de pasos que, a nuestro criterio, permite arribar a una ecuación *redox* balanceada con mayor facilidad.

Para describir los pasos del método del ion-electrón intentaremos balancear la siguiente reacción *redox* (no balanceada):



Como puede observarse, la expresión anterior no representa una ecuación ya que no está equilibrada. Para obtener la ecuación que buscamos, seguiremos de forma sistemática los pasos que se detallan a continuación. Por simplicidad omitiremos el estado de agregación en que se encuentran cada una de las sustancias intervinientes:

Paso 1: establecer cuáles son los reactivos y los productos. Escribirlos en forma iónica, salvo compuestos gaseosos, insolubles y no ionizados que se expresan en forma molecular. Identificar cuál es el elemento que se reduce y cuál el que se oxida, así como el medio (ácido o básico) en el que ocurre la reacción.

Para nuestro ejemplo:

El elemento que se **reduce** es el **Mn**. Su número de oxidación cambia de **+7 a +2** ($\text{MnO}_4^- \rightarrow \text{Mn}^{2+}$)

El elemento que se **oxida** es el **Cl**. Su número de oxidación varía de **-1 a 0** ($\text{Cl}^- \rightarrow \text{Cl}_2$)

Podemos observar la presencia de $\text{HCl}(\text{ac})$ en la reacción que nos permite inferir que esta transcurre en **medio ácido**.

Paso 2: balancear cada semirreacción en masa respecto al elemento que se oxida y se reduce. Verificar que haya el mismo número de átomos de ese elemento a ambos lados de la flecha.

En el ejemplo que estamos analizando, hay un átomo de manganeso a cada lado de la flecha ($\text{MnO}_4^- \rightarrow \text{Mn}^{2+}$). En el caso del cloro observamos que se necesitan 2 iones Cl^- para formar una molécula de Cl_2 ($2\text{Cl}^- \rightarrow \text{Cl}_2$).

Paso 3: indicar los electrones perdidos o ganados en cada semirreacción.

En este paso es necesario que nos enfoquemos nuevamente en los números de oxidación.

El número de oxidación del manganeso cambia de +7 en los reactivos a +2 en los productos, por lo tanto, ha ganado 5 electrones: $\text{MnO}_4^- + 5\text{e}^- \rightarrow \text{Mn}^{2+}$

El cloro, por su parte, pierde electrones variando su número de oxidación de -1 a 0. Notar que son necesarios 2 iones cloruro para formar una molécula de Cl_2 , por tanto, se pierden 2 electrones: $2\text{Cl}^- \rightarrow \text{Cl}_2 + 2\text{e}^-$

Paso 4: equilibrar las cargas en cada semirreacción (recordemos que la ecuación química debe estar balanceada en carga y en masa). Para ello usaremos H^+ si la reacción ocurre en medio ácido y OH^- si transcurre en medio alcalino.

¿Cómo hacemos esto? Analicemos nuestro ejemplo:

En la semirreacción de reducción ($\text{MnO}_4^- + 5\text{e}^- \rightarrow \text{Mn}^{2+}$), del lado izquierdo de la flecha tenemos una carga negativa proveniente del ion permanganato y cinco cargas negativas de los electrones ganados, esto es, una carga total de **-6**. Del lado derecho se observan 2 cargas positivas del catión Mn^{2+} , o sea un total de **+2**. Debido a que la reacción ocurre en medio ácido, debemos lograr la misma carga (no importa su valor) a ambos lados de la flecha agregando H^+ . Para ello tendremos que adicionar 8 iones H^+ del lado de los reactivos. De este modo, a ambos lados de la media reacción tendremos una carga de **+2**: $\text{MnO}_4^- + 5\text{e}^- + 8\text{H}^+ \rightarrow \text{Mn}^{2+}$

La semirreacción de oxidación posee una carga de **-2** a ambos lados de esta y, por lo tanto, está equilibrada, no siendo necesario adicionar H^+ .

Paso 5: balancear cada semirreacción respecto de los otros elementos. En este paso puede faltar en un lado de una o ambas semirreacciones un **número entero** de moléculas de H_2O .

Para la reducción del ion permanganato podemos observar que debemos balancear los átomos de oxígeno e hidrógeno, que aparecen a la izquierda de la semirreacción, pero no a la derecha. Para ello adicionamos 4 moléculas de agua del lado de los productos:



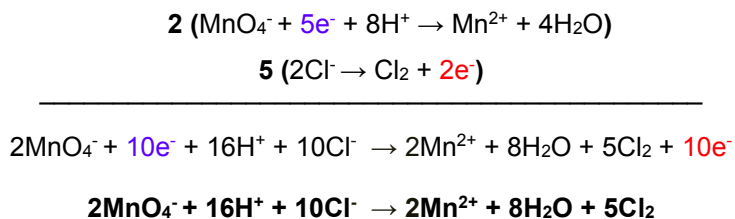
La semirreacción de oxidación está balanceada en masa y en carga:



En este paso es importante que verifiques que las semirreacciones hayan quedado equilibradas en carga y en masa, tal como ocurre con el ejemplo que estamos estudiando.

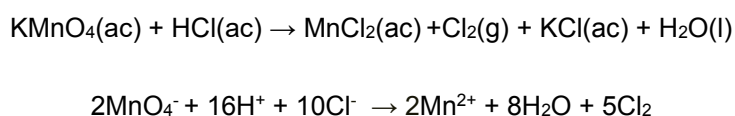
Paso 6: multiplicar, si es necesario, cada semirreacción por un número entero tal que la cantidad de electrones perdidos en la oxidación sea igual a la de electrones ganados en la reducción. Para ello, se multiplica la media reacción de oxidación por un número igual al de los electrones ganados en la reducción y la semirreacción de reducción por un número igual al de electrones perdidos en la oxidación.

Sumar las semirreacciones y simplificar los coeficientes (cuando corresponda) para obtener la **ecuación iónica total**.



De este modo hemos obtenido la ecuación iónica balanceada, que da cuenta de las especies intervinientes en la reacción de oxidación-reducción.

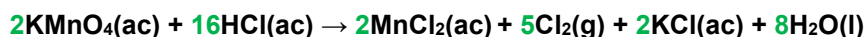
De ser requerido, podemos trasladar los coeficientes estequiométricos de cada especie desde la ecuación iónica a la ecuación molecular. Para proceder a esto, recordemos la reacción cuya ecuación nos propusimos balancear y comparémosla con la ecuación iónica total obtenida al aplicar el método del ion-electrón:



Para trasladar los coeficientes estequiométricos desde la ecuación iónica a la molecular es conveniente comenzar por aquellas especies que nos resulten más sencillas de analizar. Por ejemplo, en este caso, sabemos que el coeficiente estequiométrico para KMnO_4 y para MnCl_2 es **2** (en la ecuación iónica tenemos un 2 delante de las fórmulas de los iones MnO_4^- y Mn^{2+}). Asimismo, por comparación entre ambas ecuaciones, surge que el coeficiente estequiométrico para Cl_2 es **5** y para H_2O es **8**. Es posible que hayas notado que en la ecuación molecular aparece como producto KCl , especie que no observamos en la ecuación iónica. Esta sal surge de los iones espectadores K^+ , que acompañan al KMnO_4 , y de los aniones Cl^- que no participan de la reacción *redox* y provienen de parte del reactivo HCl . Si esto último te parece raro, no te alarmes, todavía nos falta encontrar el coeficiente estequiométrico para HCl . Este reactivo no sólo participa de la oxidación, sino que también es el que determina el medio ácido de esta reacción.

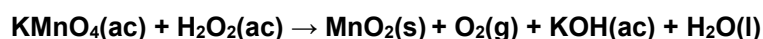
Enfoquemos entonces nuestra atención en el HCl . Si comparás las ecuaciones iónica y molecular es posible que te surja la duda si el coeficiente estequiométrico para HCl es 16 o 10 (se observan 16H^+ y 10Cl^- en la ecuación iónica). Para que la reacción ocurra es necesario garantizar la cantidad de todos los reactivos dada por la ecuación, en este caso, el coeficiente estequiométrico para el HCl debe ser 16 para cumplir con el requerimiento de los 16 iones H^+ . Sin embargo, solo 10 iones Cl^- (o 10 moles de iones Cl^- , si preferimos trabaja con cantidades molares) son oxidados a Cl_2 produciendo 5 moléculas de Cl_2 (5 moles de moléculas de Cl_2 en escala molar). ¿Dónde se encuentran los 6 iones Cl^- que no participan de la reacción *redox*? Los 6 iones Cl^- restantes son espectadores y se encuentran como tales en los productos de la reacción, es decir, no han cambiado su número de oxidación durante la reacción. Recordemos que le asignamos un coeficiente estequiométrico de 2 al MnCl_2 , requiriendo por tanto 4 iones Cl^- . Los 2 iones

Cl⁻ restantes acompañan al catión K⁺ para formar la sal KCl. Así, nuestra reacción molecular balanceada quedará:



Tal como mencionamos anteriormente, si el medio de la reacción fuera básico en el **Paso 4**, equilibraríamos las cargas con OH⁻. En el siguiente ejercicio tipo te lo mostramos.

Ejercicio tipo 8.2. Balanceá, utilizando el método del ion-electrón, la siguiente ecuación molecular (no balanceada):

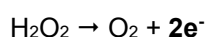


Resolución: aplicaremos el método descrito paso a paso.

Paso 1: establecer los reactivos y productos y expresarlos en forma iónica cuando sea posible. Identificar el elemento que se oxida y el que se reduce y el medio de reacción. Notar que H₂O₂, MnO₂ y O₂ no pueden expresarse en forma iónica. El **medio de reacción es básico** ya que participa la base KOH. El permanganato se reduce a óxido de manganeso (II), cambiando el número de oxidación del manganeso de +7 a +4 (MnO₄⁻ → MnO₂). El peróxido de hidrógeno se oxida a oxígeno molecular, variando el número de oxidación del oxígeno de -1 a 0 (H₂O₂ → O₂).

Paso 2: balancear cada semirreacción en masa respecto al elemento que se oxida o se reduce. En este ejemplo, cada media reacción tiene la misma cantidad de átomos que cambian de número de oxidación a la izquierda y a la derecha.

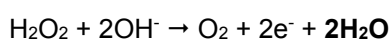
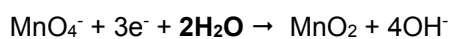
Paso 3: indicar los electrones involucrados en cada semirreacción. Por cada ion MnO₄⁻ que se reduce a MnO₂ se ganan 3 electrones; por cada molécula de H₂O₂ que se oxida a O₂ se pierden 2 electrones (notar que cada átomo de oxígeno gana un electrón cambiando su número de oxidación de -1 a 0).



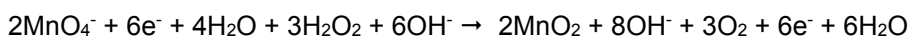
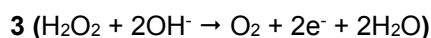
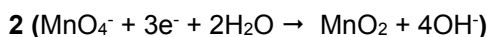
Paso 4: equilibrar las cargas en cada semirreacción, en este caso utilizando OH⁻ debido a que el medio de reacción es básico.



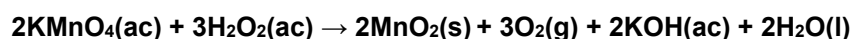
Paso 5: balancear el resto de los elementos, agregando, si es necesario, un número entero de moléculas de agua.



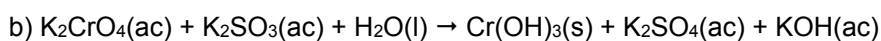
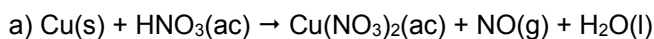
Paso 6: multiplicar cada semirreacción por un número entero de manera tal que el número total de electrones ganados en la reducción sea igual al de los perdidos en la oxidación. Sumar las medias reacciones, simplificar aquellas especies que aparecen a ambos lados de la ecuación, de ser posible, y obtener la ecuación iónica total.



Por último, trasladamos los coeficientes estequiométricos a la ecuación molecular:



Ejercicio propuesto 8.2. Utilizando el método del ion-electrón equilibrá las siguientes ecuaciones moleculares (no balanceadas):



Equivalentes y peso equivalente para reacciones de oxidación-reducción

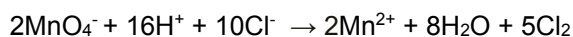
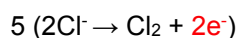
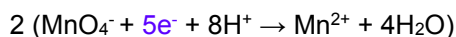
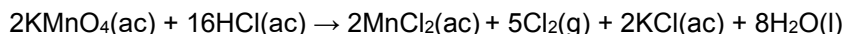
Como hemos estudiado en el capítulo 6, la definición de equivalente debe estar relacionada con el comportamiento químico de las sustancias a fin de que se cumpla el objetivo de combinarse en relación 1 a 1. El comportamiento químico de una sustancia está vinculado con la reacción en la que participa, por lo tanto, el concepto de equivalente estará ligado a un **proceso químico definido**.

Para el caso de reacciones de oxidación-reducción, se define el peso equivalente de una sustancia como la masa de ésta que gana o pierde (según se trate de una reducción o una oxidación), un mol de electrones. Para calcularlo, podemos dividir la masa molar de la sustancia oxidante o reductora por el número de electrones ganados o perdidos, respectivamente, por cada mol de sustancia.

$$\text{Peso equivalente del agente oxidante} = \frac{\text{masa molar del agente oxidante}}{\text{número de electrones ganados}}$$

$$\text{Peso equivalente del agente reductor} = \frac{\text{masa molar del agente reductor}}{\text{número de electrones perdidos}}$$

Retomemos el ejemplo de la oxidación de HCl (agente reductor) con KMnO_4 (agente oxidante) y calculemos el peso equivalente para estas sustancias.



A partir de las semirreacciones podemos observar que por cada mol de MnO_4^- (KMnO_4) que se reduce se ganan 5 moles de electrones. Decimos entonces que 1 mol de MnO_4^- (KMnO_4), para esta reacción, son 5 equivalentes de MnO_4^- (KMnO_4) y su peso equivalente será:

$$\text{Peso equivalente } \text{KMnO}_4 = \frac{\text{masa molar } \text{KMnO}_4}{\text{número de electrones ganados}} = \frac{158 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{5 \frac{\text{equivalentes}}{\text{mol}}}$$

$$\text{Peso equivalente } \text{KMnO}_4 = 31,6 \frac{\text{g}}{\text{equivalente}}$$

Haciendo un análisis similar podemos ver en la media reacción de oxidación que, por cada 2 moles de iones Cl^- (HCl) que se oxidan, se pierden 2 moles de electrones. De este modo, para la reacción estudiada, 2 moles de Cl^- (HCl) corresponden a 2 equivalentes de Cl^- (HCl), o lo que es lo mismo, 1 mol de Cl^- (HCl) es 1 equivalente de Cl^- (HCl). El peso equivalente de HCl puede calcularse del siguiente modo:

$$\text{Peso equivalente } \text{HCl} = \frac{\text{masa molar } \text{HCl}}{\text{número de electrones perdidos}} = \frac{36,5 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{1 \frac{\text{equivalente}}{\text{mol}}}$$

$$\text{Peso equivalente } \text{HCl} = 36,5 \frac{\text{g}}{\text{equivalente}}$$

De la ecuación balanceada observamos que la relación estequiométrica en moles entre reactivos y productos está dada por sus coeficientes que, en este caso, son diversos. Sin embargo, la relación entre los equivalentes de reactivos y productos **siempre será uno a uno** (1 equivalente de cada reactivo reaccionará para dar 1 equivalente de cada producto, según la ecuación balanceada). ¿Te animás a analizarlo? Tené en cuenta la definición de equivalente para las distintas sustancias que intervienen (es importante discernir si estas lo hacen como agentes oxidantes o reductores, como sales, como ácidos o como bases).

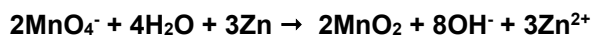
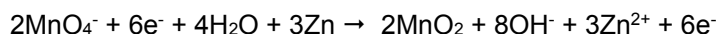
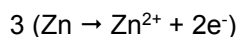
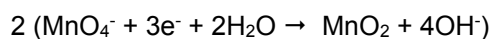
Como ya hemos mencionado, las ecuaciones balanceadas nos permitirán hacer cálculos estequiométricos similares a los estudiados en el capítulo 6.

Ejercicio tipo 8.3. Se pesan 0,900 g de una muestra que contiene Zn y se hace reaccionar con exceso de KMnO_4 en medio alcalino (KOH), obteniéndose 0,550 g de MnO_2 , con un rendimiento de 80,0%:

- Escribí la ecuación iónica balanceada por el método del ión-electrón.
- ¿Cuál es la pureza de la muestra de Zn?
- Calculá el volumen mínimo de solución de KMnO_4 0,479 M necesario para que reaccione todo el Zn.
- ¿Cuántos equivalentes de KMnO_4 son necesarios para que reaccione todo el Zn?

Resolución:

a) Como todo ejercicio que involucre cálculos estequiométricos, debemos comenzar por escribir y balancear la ecuación química que interpreta la reacción que estamos estudiando. En este caso emplearemos el método del ion-electrón. Siguiendo los pasos que hemos visto, arribaremos a las siguientes semirreacciones y ecuación iónica balanceada:



b) Para el cálculo de la pureza de la muestra que contiene Zn es necesario comparar la cantidad de este elemento que efectivamente reacciona (metal puro), con la de la muestra total. En este caso, tenemos disponible como dato la masa de producto obtenida, por lo que podemos calcular cuánto Zn reaccionó. Para ello debemos tener en cuenta que el rendimiento de la reacción es de 80,0%. Necesitaremos, además, las masas molecular y atómica relativas para MnO_2 y para Zn, que son 86,9 y 65,4, respectivamente.

80,0 g MnO_2 obtenidos \rightarrow 100 g MnO_2 esperados

0,550 g MnO_2 obtenidos \rightarrow x = 0,688 g MnO_2 esperados

2 x 86,9 g $\text{MnO}_2 \rightarrow$ 3 x 65,4 g Zn

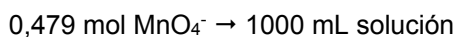
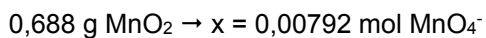
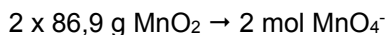
0,688 g $\text{MnO}_2 \rightarrow$ x = 0,775 g Zn

0,900 g muestra \rightarrow 0,775 g Zn

100 g muestra \rightarrow x = **86,1 g Zn** **La pureza de la muestra que contiene Zn es 86,1%.**

c) Para el cálculo del volumen mínimo de solución de KMnO_4 0,479 M necesario para que reaccione todo el Zn, podemos partir de la cantidad de Zn puro (0,775 g), de la cantidad de MnO_2 que esperábamos obtener (0,688 g) o de alguna otra estrategia que se te ocurra, debiendo arribar

al mismo resultado. Recomendamos utilizar aquellos datos que se obtuvieron de la forma más directa posible, ya sea porque son parte del enunciado del ejercicio o porque los obtuvimos haciendo el menor número de operaciones algebraicas. Esto nos ayudará a minimizar los errores en los cálculos.



$0,00792 \text{ mol MnO}_4^- \rightarrow x = \mathbf{16,5 \text{ mL solución}}$ **El volumen mínimo de solución KMnO_4 0,479 M necesario para que reaccione todo el Zn es 16,5 mL.**

d) En el inciso anterior hemos determinado que son necesarios 0,00792 moles de MnO_4^- para que reaccione completamente el Zn. Si observamos la media reacción de reducción podemos concluir que por cada mol de MnO_4^- que se reduce, se ganan 3 moles de electrones. De este modo, 1 mol de MnO_4^- corresponden a 3 equivalentes de MnO_4^- , concluyendo que son necesarios ($3 \times 0,00792$) equivalentes de MnO_4^- (KMnO_4) para que reaccione todo el Zn. **Por lo tanto, para que reaccione todo el Zn, son necesarios 0,0238 equivalentes de KMnO_4 .**

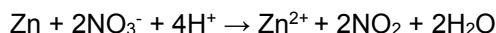
Ejercicio propuesto 8.3. Se mezclan 35,0 mL de una solución 0,104 M de $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ con 30,0 mL de solución de H_2O_2 3,89% p/v en medio ácido. Escribí la ecuación iónica balanceada por el método del ion-electrón.

Calculá el rendimiento de la reacción y la concentración molar y normal del ion Cr(III) en la solución final, si se obtuvieron 0,180 L de oxígeno en CNPT (condiciones normales de presión y temperatura, 1 atmósfera y 0 °C; considerá que 1 mol de gas en estas condiciones equivale a 22,4 L).

Ejercicio propuesto 8.4. Se quiere determinar el peso equivalente de una sal ferrosa de fórmula desconocida. Para ello, se preparan 500,0 mL de solución, en medio ácido, pesando 5,9000 g de la sal y llevando a volumen en un matraz. Posteriormente se colocan 10,00 mL de la solución preparada en un Erlenmeyer y se titula desde bureta con una solución de permanganato de potasio 0,01000 M. En el punto final de la titulación, que se evidencia por un color rosado indicativo de la primera gota en exceso del agente oxidante, se consumieron 15,50 mL de la solución de titulante.

- Escribí la ecuación iónica balanceada por el método del ion-electrón.
- ¿Cuál es la normalidad de la solución de permanganato de potasio?
- Determiná el peso equivalente de la sal ferrosa.
- Indicá cuál de las siguientes sales fue utilizada en esta experiencia: FeCl_2 , FeSO_4 , $\text{Fe}(\text{NO}_3)_2$.

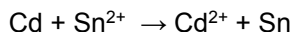
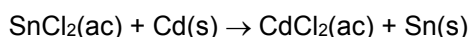
Ejercicio propuesto 8.5. Cuando se hace reaccionar Zn con una solución de ácido nítrico concentrado, se desprende un gas de color pardo (NO_2). La siguiente ecuación iónica representa este proceso:



A 2,00 g de una muestra que contiene Zn se la hace reaccionar con 30,0 mL de una solución 1,50 M de ácido nítrico, oxidando totalmente el metal. Calculá la pureza de la muestra que contiene Zn. Si se obtuvieron 0,0350 moles de NO_2 , ¿cuál fue el rendimiento de la reacción? Escribí las semirreacciones de oxidación y de reducción. Determiná el peso equivalente del agente oxidante.

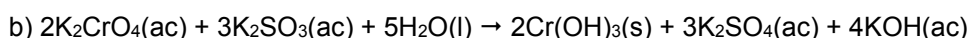
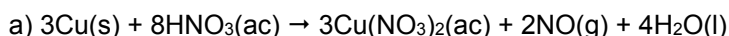
Respuestas de los ejercicios propuestos

Ejercicio propuesto 8.1.

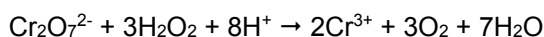


El agente oxidante es Sn^{2+} (SnCl_2) y el agente reductor Cd. Los iones Cl^- no modifican su número de oxidación durante la reacción (no se oxidan ni se reducen).

Ejercicio propuesto 8.2.

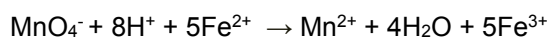
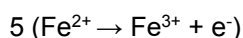


Ejercicio propuesto 8.3.



El rendimiento de la reacción es de 73,5 %. La concentración del catión Cr^{3+} en la solución final es 0,0823 M y 0,247 N.

Ejercicio propuesto 8.4.



b) La solución de permanganato de potasio 0,01000 M es 0,05000 N.

c) El peso equivalente de la sal ferrosa es 152,3 g/equivalente.

d) En esta experiencia se utilizó FeSO_4 .

Ejercicio propuesto 8.5.

La pureza de la muestra de Zn es 73,5% p/p. El rendimiento de la reacción fue de 77,8%.

Semirreacción de oxidación: $\text{Zn} \rightarrow \text{Zn}^{2+} + 2\text{e}^-$

Semirreacción de reducción: $\text{NO}_3^- + 1\text{e}^- + 2\text{H}^+ \rightarrow \text{NO}_2 + \text{H}_2\text{O}$

El peso equivalente del agente oxidante (HNO_3) es 63,0 g/equivalente.

Referencias

Congreso de la Nación Argentina (2021). Recuperado de <https://www.congreso.gob.ar/>

Copper Development Association (2021). Recuperado de <https://copperalliance.org.uk/knowledge-base/education/education-resources/copper-reactivity-patination/>

Leygraf, C., Chang, T., Herting, G., Odnevall Wallinder, I.; The origin and evolution of copper patina colour, *Corrosion Science*, 157 (2019) 337-346.

CAPÍTULO 9

Comportamiento ideal de los gases

Sofía Sampaolesi

En este capítulo analizaremos el comportamiento y las propiedades de los fluidos gaseosos puros y de mezclas gaseosas. Indagaremos en las leyes físicas que los describen, surgidas de la experimentación y observación empírica, y en los modelos utilizados en la actualidad para representar a los gases, que son fruto del trabajo mancomunado de científicos de varias partes del mundo a lo largo de un siglo. “Vivimos en el fondo de un océano de aire, el cual, por incuestionables experiencias, se sabe que tiene peso”, afirmó el físico Evangelista Torricelli en su carta al cardenal Michelangelo Ricci fechada el 11 de junio de 1644 (Viñas, 2019). Su frase describe el lugar que ocupamos en la inmensidad de la atmósfera terrestre, cuyo estudio abordaremos a lo largo del capítulo.

Lectura inicial

Todxs hemos escuchado hablar alguna vez de la atmósfera y de su importancia para la existencia de la vida en el planeta tierra. Entre otros fenómenos, la atmósfera protege a los organismos vivos de la nociva radiación de onda corta proveniente del espacio, que es absorbida por los gases oxígeno y ozono, mayoritariamente. También es responsable de que la temperatura en la troposfera, la capa atmosférica más cercana a la superficie terrestre, sea uniforme y moderada.

La atmósfera se forma por la existencia del **campo gravitatorio** de la Tierra, que ejerce un efecto atractivo sobre los gases que la constituyen. Esta atracción o aceleración de una masa gaseosa hacia la superficie terrestre (masa \times aceleración = fuerza) tiene como consecuencia el desarrollo de una **presión atmosférica**. Debido a que las partículas gaseosas más ligeras tienden a elevarse a la porción superior de la atmósfera, mientras que las más pesadas son atraídas con mayor fuerza hacia la superficie terrestre, la composición atmosférica no es uniforme, pudiendo distinguirse cuatro capas: troposfera, estratosfera, mesosfera y termosfera. La presión atmosférica disminuye a medida que ascendemos a través de estas capas y nos alejamos de la Tierra.

Cerca del nivel del mar, el aire atmosférico se compone esencialmente de O_2 y N_2 (99%) y de pequeñas cantidades (trazas) de otros gases, como el CO_2 y gases nobles. Existen otras trazas

de sustancias gaseosas en el aire de ambientes naturales, cuya concentración ocasionalmente aumenta cuando son intervenidos por la actividad humana. Este desbalance en las concentraciones relativas de los gases atmosféricos tiene importantes consecuencias ecológicas; entre ellas, el largamente estudiado efecto de invernadero o calentamiento global. Uno de los gases responsables de este efecto es el metano, CH_4 , un gas incoloro, inflamable y no tóxico presente en concentraciones de 1,8 ppm en la atmósfera. Cada molécula de metano causa alrededor de 25 veces el efecto invernadero causado por una molécula de CO_2 , aunque su vida media y su abundancia en la atmósfera son sustancialmente menores. Las consecuencias de la presencia de este gas no se reducen sólo a eso: el metano participa en reacciones químicas que generan a su vez otros gases de efecto invernadero, como el O_3 a nivel de la troposfera y vapor de agua en la estratosfera.

Una reducción en las emisiones de metano redundaría en efectos positivos sobre la salud atmosférica, pero ¿de dónde proviene este gas? Una proporción es de origen natural, producida por la microflora propia de ambientes donde la presencia de oxígeno es escasa. Pero casi dos tercios del metano emitido se vinculan con actividades humanas, industriales y agrícolas. Entre ellas, la cría de ganado rumiante, vacas y ovejas.

Los rumiantes producen metano durante su digestión, en el rumen, la primera porción de su intestino. Este órgano está habitado por una microflora abundante en bacterias y arqueas (*Archaea*) anaeróbicos. Estos microorganismos viven en ausencia de O_2 , realizando la fermentación de los vegetales consumidos por el rumiante. Como consecuencia de esta fermentación se producen importantes cantidades de metano; el exceso de presión de metano es liberado por el animal mediante espiraciones o eructos y se acumula en el ambiente.

Una vaca produce entre 250 y 500 litros de metano diarios, en promedio. Debido al aumento de la población de rumiantes para satisfacer las necesidades humanas de leche, carne, queso y demás lácteos, que asciende a unos 1500 millones de ejemplares en la actualidad, la emisión de metano debida al ganado es, según datos de la FAO (*Food and Agriculture Organization*, 2021), de entre 100 y 115 millones de toneladas de gas anuales.

Un grupo de científicos en Nueva Zelanda (AgResearch) se encuentra desarrollando una vacuna contra los metanógenos, nombre que se le da a los microorganismos productores de metano, con el objetivo de reducir la cantidad de gas que genera el ganado (Watts, G. 2019). Otras estrategias apuntan a la selección de animales que naturalmente producen menor cantidad de gas o al diseño de dietas especiales que reduzcan la emisión de metano hasta un 25%. Según Patricia Ricci, investigadora del Instituto Nacional de Tecnología Agropecuaria (INTA Balcarce, Argentina), es necesario “un manejo sustentable para poder continuar generando carne y leche de una manera más eficiente. Los gases de efecto invernadero siempre existieron por parte de los rumiantes. Es el resultado biológico de los procesos de digestión. Un país ganadero no puede evitarlos. Pero mejorar la producción, la calidad de los pastos y los suplementos alimentarios redundará en menos gases” (Ibáñez, 2019).

Gases

Los gases se caracterizan por ocupar todo el volumen del recipiente que los contiene, **se expanden** de forma espontánea. Esta propiedad los diferencia de los otros estados de agregación de la materia, como los líquidos y los sólidos, que poseen volúmenes definidos. Además, mientras que los líquidos son muy poco compresibles y los sólidos casi no pueden comprimirse, los gases son fácilmente **compresibles**. Estas características se deben a que las **partículas individuales** (átomos, moléculas) que componen la **masa gaseosa** están relativamente alejadas unas de otras. Por ejemplo, las moléculas gaseosas ocupan alrededor del 0,1% del volumen total del aire que respiramos. El espacio restante se encuentra vacío. Esta condición posibilita que cada molécula se comporte como si las otras no estuvieran presentes; este es uno de los fundamentos de los **modelos** que intentan explicar y predecir el comportamiento de las masas gaseosas en **condiciones atmosféricas**, y que estudiaremos a lo largo de este capítulo.

En general, se denomina gases a aquellas sustancias que adoptan el estado de la materia que se caracteriza por no tener forma ni volumen propio, ocupando todo el espacio que las contiene. Las sustancias que son gases se componen exclusivamente de elementos no metálicos, tienen fórmulas moleculares sencillas y, en consecuencia, masas molares relativamente pequeñas. Sin embargo, las sustancias que son líquidos o sólidos, a presiones y temperaturas ordinarias, pueden existir en el estado gaseoso en condiciones apropiadas. Resulta cotidiano observar agua en estado gaseoso durante el proceso de calentar agua líquida para preparar mate u otra infusión, lo que llamamos comúnmente vapor de agua. El **vapor** se refiere al estado gaseoso de una sustancia que, al ser comprimido isotérmicamente, comienza a condensar pasando al estado líquido o sólido. El **gas** se diferencia del vapor porque si se lo comprime isotérmicamente, nunca llega a condensar, aún a presión elevada.

El gas más ubicuo es el aire, que es realmente una mezcla de varias especies gaseosas. Las **mezclas gaseosas** son siempre **homogéneas**, es decir, son **soluciones de gas en gas**. Los gases forman mezclas homogéneas unos con otros sin importar sus identidades ni las proporciones relativas de cada uno. Entre los gases que componen al aire que respiramos, se encuentran en mayor proporción el **gas nitrógeno**, N_2 (aprox. 78,0%), y el **gas oxígeno**, O_2 (aprox. 20,9%), **especies gaseosas diatómicas**. El resto consiste en pequeñas cantidades de gases nobles y dióxido de carbono, CO_2 (0,375%), una **especie gaseosa molecular**. Para expresar la concentración de estas **sustancias traza** es común utilizar la unidad partes por millón (ppm), presentada en el capítulo 7, que aplicada a mezclas gaseosas refiere a 1 parte en volumen en 1 millón de unidades totales de volumen (1 V:1000000 V).

Los gases atmosféricos ilustran cómo las sustancias gaseosas pueden estar constituidas por tan solo un átomo, por varios átomos del mismo elemento o por una variedad de elementos. Además de los gases oxígeno y nitrógeno, las **sustancias diatómicas** H_2 , F_2 y Cl_2 existen como gases en condiciones de temperatura y presión atmosféricas. Es también el caso de los gases nobles, He, Ne, Ar, Kr, y Xe, que son **gases monoatómicos**. Ejemplos de **gases moleculares** comunes en la vida cotidiana son el metano, CH_4 , el propano, C_3H_8 , y el butano, C_4H_{10} , gases

combustibles utilizados en la cocción de alimentos y la calefacción hogareña; el amoníaco, NH_3 , un gas irritante que se percibe en ciertas tinturas de cabello; y el sulfuro de hidrógeno, H_2S , al que puede atribuirse el “olor a huevo podrido”.

El experimento de Torricelli

La fuerza de gravedad, que atrae hacia el centro de la Tierra a todos los objetos que se encuentran en su superficie, también ejerce su efecto sobre los átomos y moléculas que componen la atmósfera. Gracias a las **energías térmicas de movimiento** de las pequeñas partículas gaseosas, que se oponen al efecto de las **fuerzas gravitacionales**, la atmósfera no se amontona como una delgada capa sobre la superficie terrestre, sino que se distribuye en varias capas de kilómetros de altura y composición característica. Como resultado del efecto neto de la fuerza de gravedad sobre la atmósfera existe una **presión atmosférica**.

La presión, P , es una magnitud física que se define como la **fuerza** F que actúa sobre un **área** dado, A :

$$P = \frac{F}{A} \quad [9.1]$$

Los gases ejercen una presión sobre cualquier superficie con la que hacen contacto; el gas que contiene un globo inflado ejerce presión sobre cada punto de la cara interna del globo, expandiendo el látex. Los gases atmosféricos bajo las fuerzas gravitacionales ejercen presión sobre la superficie terrestre.

En el siglo XVII, el físico y matemático Evangelista Torricelli (1608-1647) se propuso demostrar que la atmósfera tenía peso, idea contraria a las creencias de la época, y diseñó un sencillo experimento. Tomó un tubo de vidrio cerrado en uno de sus extremos, similar a un tubo de ensayo pero de aproximadamente un metro de longitud, y completó su volumen con mercurio líquido, cuidando de no dejar burbujas de aire en su interior. Luego, invirtió este tubo sobre un recipiente, a su vez lleno de mercurio líquido, que se encontraba abierto a la atmósfera. La figura 9.1 representa un arreglo similar al utilizado por Torricelli en sus experimentos. El científico observó repetidas veces que, al invertir el tubo lleno de mercurio, el nivel del líquido descendía, pero no hasta vaciarse por completo; el flujo se detenía cuando podía medirse una altura de columna de mercurio de 760 mm. Torricelli llegó a la conclusión de que ese era el valor de la presión atmosférica, ¿qué fue lo que observó este investigador?

Si nos detenemos en los puntos A y B de la figura 9.1, vemos que ambos se encuentran a la misma altura, sobre la superficie del líquido, pero uno dentro de la columna de mercurio y el otro fuera de la misma y en contacto con la atmósfera. Al encontrarse a la misma altura, y ser fluidos en reposo, podemos afirmar que sobre ambos puntos se ejerce la misma fuerza gravitacional y, por lo tanto, la misma presión. Al expresar dicha fuerza en términos de presiones, se observa que sobre el punto B la presión es igual a la presión atmosférica (P_{atm}) a esa altura:

$$P_B = P_{atm}$$

Sobre el punto A, la presión ejercida no es efecto de la presión atmosférica, ya que el tubo se encuentra cerrado en su extremo superior. Podemos identificar dos columnas ubicadas sobre A, una de mercurio líquido y otra superior de espacio vacío que dejó el mercurio al desplazarse. De modo simplificado, podemos considerar que espacio vacío no contiene átomos o moléculas que puedan ejercer fuerza alguna, por lo que toda la presión sobre el punto A se debe a la columna de mercurio (Hg):

$$P_A = P_{columna\ Hg}$$

Como se mencionó, la presión en el punto A y en el punto B es la misma, por lo tanto:

$$P_A = P_B$$

$$P_{atm} = P_{columna\ Hg}$$

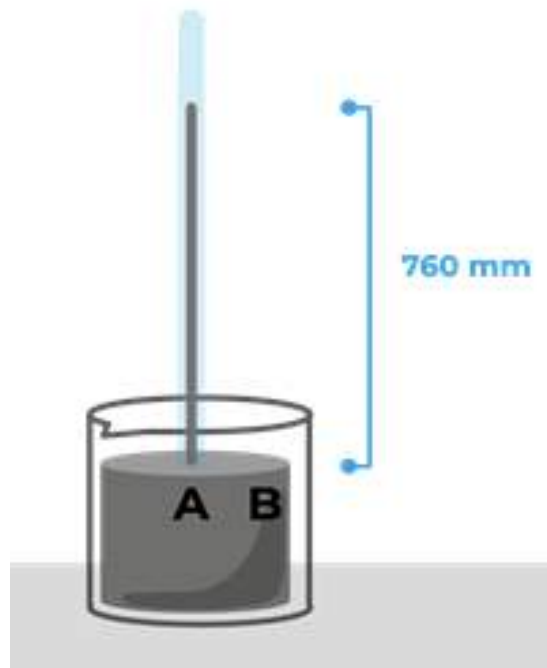


Figura 9.1. Representación esquemática del experimento de Torricelli, que condujo a la invención del barómetro de mercurio.

Este razonamiento permitió a Torricelli afirmar que había determinado el valor de la presión atmosférica a nivel del mar como la presión que ejerce una columna de 760 mm de mercurio. ¿Cómo se relaciona la presión ejercida por la atmósfera con la altura de la columna de mercurio? Analicemos la definición de presión mostrada en la ecuación [9.1]. En este caso, la fuerza es la ejercida por la columna de mercurio, $F = m \times g$, siendo g la aceleración de la gravedad. A su vez,

la masa del líquido puede expresarse en términos de su densidad, ρ , como $m = \rho \times V$, donde V es el volumen de mercurio. Por último, expresamos el volumen de la columna de mercurio como el área interna del tubo, A , multiplicada por la altura de la columna, h . De este modo, la presión puede expresarse como:

$$P = \frac{F}{A} = \frac{m g}{A} = \frac{\rho V g}{A} = \frac{\rho h A g}{A} = \rho h g \quad [9.2]$$

La ecuación [9.2] muestra que la presión que ejerce la columna de mercurio es directamente proporcional a su altura. El mercurio dentro del tubo bajará hasta que la presión ejercida por la columna de líquido equilibre a la presión atmosférica ($h = 760 \text{ mm}$). La ecuación [9.2] vincula la presión de cualquier gas a la altura de la columna de un líquido y su densidad.

Ejercicio propuesto 9.1. Calcúlala presión total que soporta una persona que bucea a 40,00 m de profundidad si la densidad del agua de mar a 25 °C es 1,0243 g/cm³.

A partir de los experimentos de Torricelli se definió a los **milímetros de mercurio (mm Hg)** o **centímetros de mercurio (cm Hg)** como *unidades de medida de la presión atmosférica*. Existen otras unidades para expresar el valor de la presión. Como estudiamos en el capítulo 2, el Sistema Internacional (SI) define el **Pascal (Pa)**, denominado en honor al investigador Blaise Pascal (1623-1662), como la presión que ejerce una fuerza de 1 newton (N) sobre una superficie de 1 metro cuadrado (m²) normal a la misma; en este sistema de medida, la presión atmosférica tiene un valor de 101325 **Pa** (N/m²), o 1013,25 **hPa** (hectopascuales). El servicio meteorológico suele informar la presión atmosférica en hPa o en una unidad equivalente, los **milibares (mbar)**: 1 hPa = 1 mbar. Es decir, el valor de la presión atmosférica es de 1013,25 mbar.

En el laboratorio, generalmente se utilizan unidades de mm de Hg o **atmósferas (atm)**. La presión atmosférica estándar, que corresponde a la **presión normal a nivel del mar**, se define como de 1 atm. Otra unidad comúnmente empleada y que tiene equivalencia exacta con los mm Hg, es el torr (**Torr**), denominada así en honor a Torricelli. En síntesis, las equivalencias más empleadas para expresar la presión atmosférica son:

$$1 \text{ atm} = 760 \text{ Torr} = 760 \text{ mm Hg} = 76 \text{ cm Hg} = 101325 \text{ Pa} = 1013,25 \text{ hPa} = 101,325 \text{ kPa}$$

Medida de la presión

El **barómetro de Fortín** es un equipo comúnmente utilizado para **medir presión atmosférica** y que emula el diseño experimental de Torricelli. Consiste en un tubo de vidrio de unos 850 mm de altura, cerrado por el extremo superior. El tubo se llena de mercurio, se invierte

y se coloca el extremo abierto en un recipiente lleno del mismo líquido y expuesto a la presión atmosférica. Se mantiene adosado a una escala fija con *vernier* (o escala móvil), donde puede leerse la presión de forma directa en cm de Hg hasta la centésima de precisión. La calibración de este equipo se realiza moviendo el reservorio de mercurio abierto a la atmósfera que se encuentra en la porción inferior, de forma que el nivel de mercurio que contiene coincida con el cero de la escala fija⁴.

Existen otros instrumentos que se utilizan para medir la **presión de líquidos o gases contenidos** en un recipiente cerrado, denominados **manómetros**. La **presión manométrica** medida toma como referencia la presión atmosférica, es decir, una presión manométrica nula equivale a la presión atmosférica. Usos cotidianos del manómetro son la detección de la presión de aire dentro de un neumático, de la presión de gas combustible dentro de una garrafa o de la presión de un gas dentro de un cilindro.

El manómetro más sencillo consiste en un tubo de vidrio doblado en U que contiene un líquido apropiado, dependiendo de la magnitud de las presiones que se quieren medir (mercurio, agua, aceite, entre otros). Una de las ramas del tubo está abierta a la atmósfera; la otra está conectada a un recipiente cerrado que contiene el fluido cuya presión se desea medir (Figura 9.2).

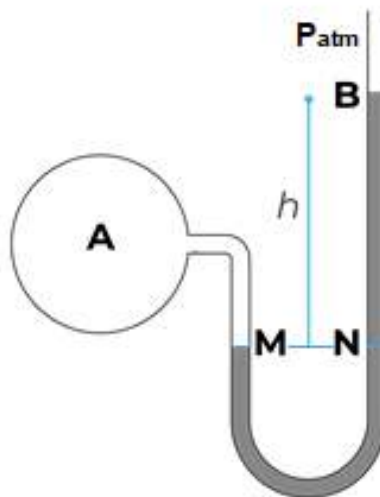


Figura 9.2. Manómetro de rama abierta.

Tanto barómetros como manómetros permiten medir presiones como lo hizo Torricelli, contemplando que, para fluidos en reposo, dos puntos que se encuentran a idéntica altura están afectados por las mismas fuerzas gravitacionales y, por lo tanto, por la misma presión.

⁴ El funcionamiento del barómetro de Fortín y su calibración pueden consultarse en <https://www.youtube.com/watch?v=UHK5ze-QepDs> (Udelar, 2019).

Ejercicio tipo 9.1. Se mide la presión de una masa gaseosa contenida en el balón A, determinando una diferencia h entre las ramas de mercurio de 12,40 cm, tal como se ilustra en la figura 9.2. Si la presión atmosférica es 759,5 mm Hg, ¿cuál es la presión de ese gas?

Resolución

Para abordar esta pregunta debemos buscar dos puntos en el esquema del manómetro que se encuentren a la misma altura y nos permitan adquirir información acerca del gas contenido. El punto **M** se encuentra justo sobre la superficie de mercurio en contacto con el gas que se estudia. Otro punto a idéntica altura es **N**, que se encuentra en el interior de la rama abierta del manómetro, dentro del mercurio. Seleccionando estos puntos, es posible afirmar:

$$P_M = P_N$$

Sobre el punto **M**, conectado al balón A cerrado a la atmósfera, el gas ejerce presión sobre la superficie del mercurio:

$$P_M = P_{gas}$$

Sobre el punto **N**, podemos identificar una columna de mercurio de altura h (12,40 cm) que ejerce presión. Como esa rama del manómetro se encuentra abierta a la atmósfera, también la presión atmosférica ejerce su efecto sobre **N**:

$$P_N = P_{columna\ h} + P_{atm}$$

Habiendo definido la presión sobre cada punto y recordando que $P_M = P_N$:

$$P_{gas} = P_{columna\ h} + P_{atm}$$

Suponiendo una presión atmosférica de 759,50 mm Hg (75,950 cm Hg):

$$P_{gas} = 12,40\text{ cm Hg} + 75,950\text{ cm Hg} = \mathbf{88,35\text{ cm Hg}}$$

La presión del gas en el balón A es 88,35 cm Hg.

Ejercicio propuesto 9.2. ¿Cómo imaginas que se comportaría un manómetro de tubo en U si en el balón A se encerrara un gas de presión inferior a la presión atmosférica? Ensayá un esquema del manómetro donde ubiques la altura relativa de las ramas de mercurio.

Ejercicio tipo 9.2. ¿Qué valor en atm, Torr, cm Hg y mbar tiene una presión de 1045 hPa?

Resolución

Un modo sencillo de interconvertir unidades de presión es emplear el análisis dimensional:

$$1045 \text{ hPa} \times \frac{760 \text{ Torr}}{1013,25 \text{ hPa}} = 783,8 \text{ Torr}$$

$$1045 \text{ hPa} = 1045 \text{ mbar}$$

$$1045 \text{ hPa} \times \frac{1 \text{ atm}}{1013,25 \text{ hPa}} = 1,031 \text{ atm}$$

$$1045 \text{ hPa} \times \frac{76 \text{ cm Hg}}{1013,25 \text{ hPa}} = 78,38 \text{ cm Hg}$$

Ejercicio propuesto 9.3. Completá la siguiente tabla con equivalencias.

mm Hg	cm Hg	Torr	kPa	atm	mbar
	75,85				
					990,3
		762,2			
			198,54		
859,0					
				1,500	

Comportamiento de los gases

Tras largos años de experimentación, un grupo de científicos determinó que el comportamiento observable (macroscópico) o **estado** de un gas puede describirse a partir de cuatro variables fácilmente medibles en el laboratorio: su **presión**, su **temperatura**, el **volumen** que ocupa y la cantidad de gas, usualmente medida en **moles**. En este apartado estudiaremos las relaciones que se establecen entre estas **variables macroscópicas**.

Es interesante destacar que el modo en que los investigadores llevaron a cabo sus experimentos para dilucidar tales relaciones constituyen de los primeros registros históricos del **método científico**: cada **ley** surgió de un diseño experimental en el cual se **mantuvieron constantes**

dos variables macroscópicas, es decir, se fijaron como **parámetros** experimentales, para estudiar cómo se afectan mutuamente las otras dos variables. Luego, los datos experimentales se **generalizaron** en una “ley” **empírica**.

Relación entre presión y volumen de un gas

El químico británico Robert Boyle (1627-1691) fue el primero en experimentar con gases y llegar a ciertas conclusiones respecto de la relación entre la presión (**P**) de una masa gaseosa y su volumen (**V**). Para ello, utilizó un tubo en forma de J, similar al tubo del manómetro de ramas abiertas (figura 9.2), que, en lugar de tener una rama con posibilidad de conectarse a un balón, tenía un extremo cerrado a la atmósfera en el cual se encontraba retenida una masa de gas, detrás de la columna de mercurio. Boyle aumentó la presión ejercida sobre el gas atrapado, agregando porciones de mercurio en la rama abierta a la atmósfera, y comprobó que el volumen del gas se reducía con cada agregado. Si aumentaba la presión al doble de la inicial, el volumen se reducía a la mitad. *Obsérvese que en este diseño experimental la temperatura y cantidad de gas se mantuvieron constantes.* Al graficar los resultados de sus experimentos se obtuvieron curvas similares a las de la figura 9.3:

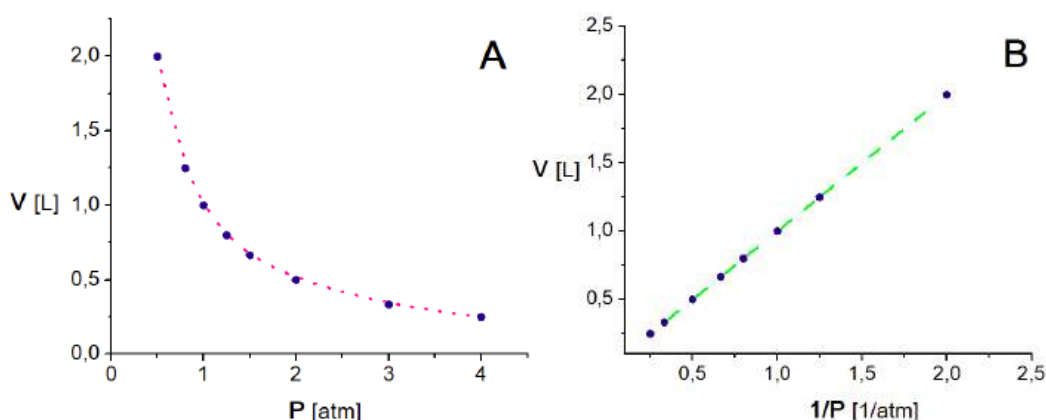


Figura 9.3. Curvas basadas en los experimentos de Boyle, V en función de P (A) y V en función de 1/P (B).

Edme Mariotte (1620-1684), físico y botánico francés, llegó a las mismas conclusiones que Boyle realizando experimentos de forma independiente. La **Ley de Boyle-Mariotte** enuncia las observaciones de estos investigadores de la siguiente forma: *el volumen de una cantidad fija de gas mantenida a temperatura constante es inversamente proporcional a la presión.* Matemáticamente se expresa:

$$P = constante \times \frac{1}{V} \quad \text{o} \quad P \times V = constante \quad [9.2]$$

El valor de la *constante* depende de la cantidad de gas y de su temperatura. De este modo si tenemos una cantidad fija de gas, a temperatura constante, inicialmente ocupando un volumen V_1 a una presión P_1 , y luego su estado cambia a un volumen V_2 , con una presión P_2 :

$$P_1 \times V_1 = P_2 \times V_2$$

La ley de Boyle-Mariotte explica cómo respiramos. Nuestros pulmones se comportan como bolsas esponjosas y fácilmente expandibles. Cuando inhalamos, el músculo diafragma desciende y los músculos intercostales se contraen, ampliando el volumen de la caja torácica. El efecto inmediato es un descenso de la presión interna, que es, en ese instante, inferior a la presión atmosférica. Como consecuencia de la diferencia de presiones, el aire ingresa a nuestros pulmones, que se expanden, hasta que la presión interna iguala la presión atmosférica. En la exhalación, el diafragma asciende y los músculos intercostales se relajan, con la consecuente reducción del volumen del tórax. Esto aumenta la presión interna, momentáneamente, a valores superiores a la presión atmosférica, lo que provoca la liberación del aire contenido al exterior.

Ejercicio propuesto 9.4. Cuando se presiona el pistón de un inflador de bicicleta el volumen interior disminuye de 100 cm³ a 20,0 cm³ antes de que el aire fluya al neumático. Suponiendo que la compresión es isotérmica y que la presión inicial es 1,00 atm, calculá la presión final.

Ejercicio propuesto 9.5. Si la capacidad pulmonar promedio de una persona a 1,0 atm es de 6,0 L, calculá el volumen que ocupa el aire en sus pulmones cuando se sumerge 40 m bajo agua. Suponé que la temperatura permanece constante.

Relación entre temperatura y volumen de un gas

En 1787, el científico francés Jacques Charles (1746-1823) determinó experimentalmente que *el volumen de una cantidad fija de gas a presión constante aumenta de forma lineal con la temperatura*. La figura 9.4 ilustra datos obtenidos a partir de un experimento similar al realizado por Charles.

En la figura se destaca una porción de curva extrapolada en color violeta (figura 9.4). Dicha recta interseca el eje de abscisas en los -273 °C, temperatura a la cual no se podría tener un gas, ya que todos los gases conocidos se licúan o solidifican a temperaturas superiores. Además, del gráfico puede inferirse que dicha temperatura se corresponde con un volumen cero de gas, algo que es físicamente imposible. Sin embargo, a partir de la extrapolación del comportamiento gaseoso observado a temperaturas mayores, se predice que un **gas hipotético** tendría un volumen nulo a -273,15 °C.

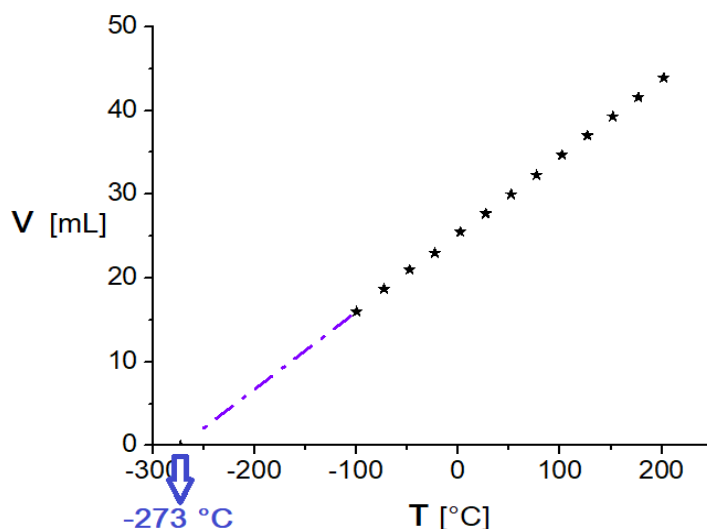


Figura 9.4. Volumen de un gas en función de la temperatura a presión constante.

Más de 60 años después, el físico británico William Thomson (1824-1907), que ostentaba el título de Lord Kelvin, propuso una nueva escala de temperatura, cuya unidad equivale al grado de la escala Celsius, pero está desplazada de forma que el 0 de la escala Kelvin, que se conoce como **cero absoluto**, se corresponde con los -273,15 grados de la escala Celsius (figura 9.5). La temperatura en esta escala se simboliza (K). Un gráfico de volumen de una determinada cantidad de gas, a presión constante, en función de temperatura absoluta se ajusta a una recta que extrapolada pasaría por el origen.

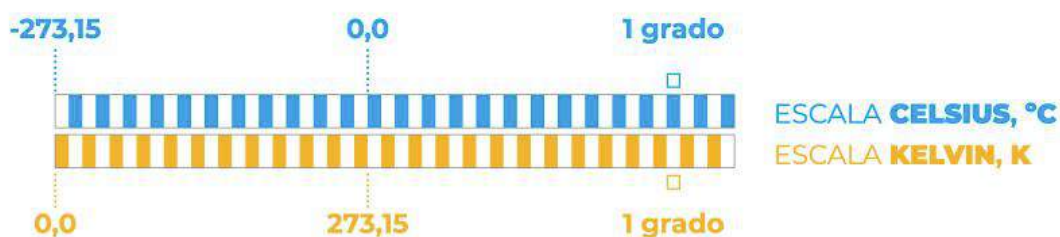


Figura 9.5. Comparación de escalas de temperatura Celsius y Kelvin (absoluta).

A partir de la definición de la escala Kelvin, la **ley de Charles** se puede expresar como: *el volumen de una cantidad fija de gas mantenida a presión constante es directamente proporcional a su temperatura absoluta*. Matemáticamente:

$$V = constante \times T \quad \text{o} \quad \frac{V}{T} = constante \quad [9.3]$$

El valor de la *constante* depende de los parámetros de presión y cantidad de gas en el recipiente. Así, si tenemos una cantidad fija de gas, a presión constante, inicialmente ocupando un

volumen V_1 a una temperatura T_1 (en K), y luego su estado cambia a un volumen V_2 , con una temperatura T_2 (en K):

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2}$$

Como se mencionó, si se grafica el volumen de una cantidad determinada de gas, a presión constante, en función de la temperatura en grados Celsius se obtendría un gráfico como el de la figura 9.6. (A). Los datos se ajustan a una recta que extrapolada interseca en $-273,15\text{ }^\circ\text{C}$ (0 K) sobre el eje x.

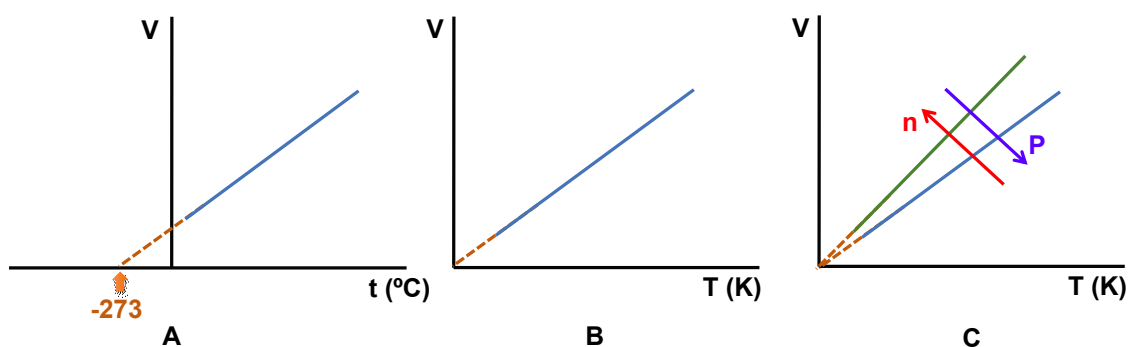


Figura 9.6. Volumen de un gas en función de la temperatura en $^\circ\text{C}$ (A) y en K(B). Variación del volumen de un mismo gas cuando cambia la presión y el número de moles (C).

Un gráfico de volumen versus temperatura absoluta, a moles y presión constantes, se ajusta a una recta que extrapolada pasaría por el origen (figura 9.6. (B)). Si para un gas determinado, variásemos el número de moles (a volumen constante) o el volumen (para moles constantes), se obtendría el gráfico de la figura 9.6. (C). Se puede observar un aumento en la pendiente de la recta cuando se incrementa el número de moles y una disminución de la misma cuando aumenta el volumen. Es posible que necesites avanzar en la lectura de este capítulo para lograr comprender mejor la figura 9.6. (C).

La ley de Charles permite entender el riesgo de explosión si se calienta una lata de aerosol por encima de la temperatura segura indicada; al calentar el recipiente rígido, el freón, un gas inerte utilizado típicamente en aerosoles, tenderá a expandirse y escapar intempestivamente o explotar.

Relación entre la presión y la temperatura

La variación de la presión con la temperatura, para una cantidad dada de gas a un volumen constante, fue estudiada por Joseph Louis Gay-Lussac (1778-1823). La **ley de Gay-Lussac** puede expresarse: *a volumen constante la presión de una masa determinada de gas es proporcional a su temperatura absoluta*. Matemáticamente:

$$P = \text{constante} \times T \quad \text{o} \quad \frac{P}{T} = \text{constante} \quad [9.4]$$

El valor de la constante dependerá de la cantidad de gas y del volumen. De este modo, si tenemos una cantidad fija de gas, a volumen constante, inicialmente a una presión P_1 y a una temperatura T_1 (en K), y luego su estado cambia a una presión P_2 , con una temperatura T_2 (en K):

$$\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2}$$

Si se grafica la presión de una cantidad determinada de gas, a volumen constante, en función de la temperatura en grados Celsius se obtendría un gráfico que ajusta a una recta cuya extrapolación interseca el eje x en $-273,15 \text{ }^\circ\text{C}$ (0 K) (figura 9.7 (A)).

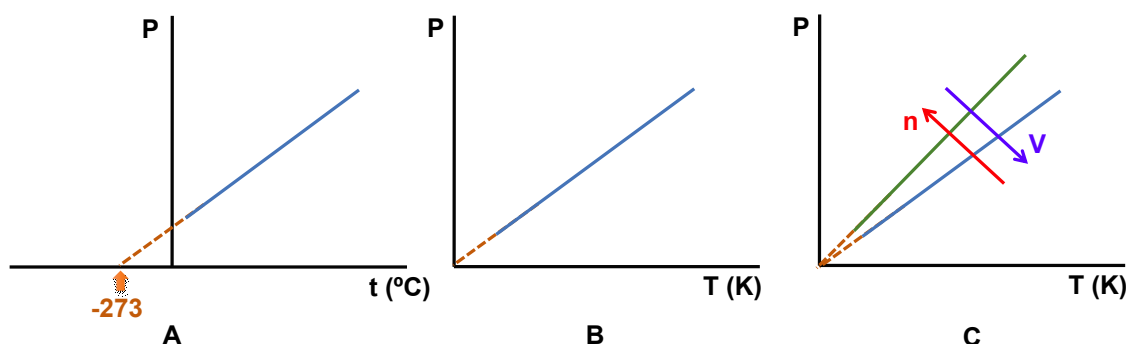


Figura 9.7. Presión de un gas en función de la temperatura en $^\circ\text{C}$ (A) y en K (B). Variación de la presión de un mismo gas cuando cambia el volumen y el número de moles (C).

Un gráfico de presión versus temperatura absoluta se ajusta a una recta que extrapolada pasaría por el origen (figura 9.7 (B)). En la figura 9.7 (C) se muestra la variación de la presión de un gas en función de la temperatura cuando varía el número de moles, a volumen constante, (aumenta la pendiente) y cuando cambia el volumen sin variar el número de moles (disminuye la pendiente). Te invitamos a que analices este comportamiento en función de las leyes estudiadas en este apartado.

Ejercicio propuesto 9.6. En el envase de cualquier aerosol podrás observar la leyenda “No arrojar al fuego o al incinerador”. ¿Podés dar una explicación para esto? Si la presión de un gas dentro de una lata de aerosol es de 1,5 atm a 25°C , ¿cuál es la presión dentro de la lata si se calienta a 450°C ?

Relación entre cantidad y volumen de un gas

La relación entre la cantidad de gas y el volumen, en condiciones de presión y temperatura constantes, fue estudiado por Joseph Louis Gay-Lussac (1778-1823) y Amadeo Avogadro (1776-

1856), quienes arribaron a la siguiente conclusión: *volúmenes iguales de gases diferentes, a la misma temperatura y presión, contienen números iguales de moléculas*. La **ley de Avogadro** es consecuencia de la hipótesis de Avogadro: *el volumen de un gas mantenido a temperatura y presión constantes es directamente proporcional al número de moles del gas*. Matemáticamente, se expresa:

$$V = constante \times n \quad \text{o} \quad \frac{V}{n} = constante \quad [9.5]$$

Con un valor de *constante* definido a una presión y temperatura determinadas. La enunciación de esta ley permitió definir ciertas **Condiciones Normales de Presión y Temperatura (CNPT)**, para las cuales se conoce que un mol ($6,022 \times 10^{23}$ átomos o moléculas) de **cualquier gas** ocupa aproximadamente 22,4 L (1 mol de un *gas hipotético* en CNPT ocupa exactamente 22,4 L). Estas condiciones son **1 atm y 273,15 K (0°C)**.

Problema propuesto 9.7. Las plantas producen el gas etileno, que actúa como una hormona volátil que favorece la maduración de sus frutos. Las grandes cámaras frigoríficas donde se conserva y madura la fruta cosechada tienen una atmósfera enriquecida en etileno, que produce la propia fruta. Una cámara rectangular de 65 m² de superficie y 3,0 m de altura, a 0,0 °C y presión atmosférica, ¿cuántos moles y moléculas de gas contiene? Si el 1,5% de esos moles gaseosos corresponden a etileno, ¿cuántas moléculas de etileno contiene?

Un aspecto para controlar durante la conservación es que la cámara posea una adecuada ventilación para prevenir que la propia respiración de los frutos genere una atmósfera con un nivel de oxígeno inferior al 2,0% en volumen, puesto que ciertas frutas dependen de la presencia de este gas para finalizar su maduración. ¿Cuántas moléculas de oxígeno representa este porcentaje en la cámara? Si se inyecta O₂, manteniendo las mismas P y T de la cámara, hasta alcanzar una concentración final del 12%, ¿cuántos litros de gas se inyectaron? Considera que inicialmente se contaba con una atmósfera del 2,0% en oxígeno.

Modelo del gas ideal

Un gas ideal es un *gas hipotético*, que no existe, pero que permite modelizar de forma adecuada el comportamiento de los gases reales en determinadas condiciones. Por ejemplo, para trabajos de rutina en el laboratorio, en condiciones de presión y temperatura ordinarias, este modelo se ajusta adecuadamente al comportamiento observado. Al alejarse de estas condiciones, las masas gaseosas pueden tener comportamientos que el **modelo del gas ideal** no logre predecir correctamente. Como estudiaremos más adelante, el comportamiento de los gases reales se acerca al predicho por el modelo del gas ideal a bajas presiones y altas temperaturas. Se debe tener en cuenta que el concepto de altas presiones y bajas temperaturas dependerá estrictamente de la naturaleza del gas real.

El comportamiento gaseoso se describe a través de la **ley de los gases ideales**, que surge como generalización de las observaciones de Boyle, Mariotte, Charles, Gay-Lussac y Avogadro, presentadas sintéticamente en el siguiente cuadro:

Ley de Boyle-Mariotte	Ley de Charles	Ley de Avogadro
$V \propto \frac{1}{P}$	$V \propto T$	$V \propto n$
T y n constantes	P y n constantes	P y T constantes

Es posible combinar las tres leyes en una ley general, que contemple todas las variables que describen el comportamiento de un gas:

$$V \propto \frac{T n}{P}$$

Para obtener una ecuación matemática, se propuso una constante de proporcionalidad, conocida como **constante de los gases, R**, denominada *constante universal* ya que adopta un mismo valor para todos los gases. Reordenando se obtiene:

$$P V = n R T \quad [9.6]$$

La ecuación [9.6] se conoce como **ley de los gases ideales**, y es un ejemplo de **ecuación de estado**, esto es, una expresión que relaciona la presión, el volumen, la temperatura y la cantidad de sustancia, en este caso de un gas. *La temperatura debe expresarse siempre en la escala absoluta (K) y la cantidad de gas en moles.* El valor de **R** dependerá de las unidades que se utilicen para las variables de gas. Típicamente, adopta el valor de:

$$R = 0,0821 \frac{L \text{ atm}}{K \text{ mol}}$$

En este caso, el *volumen del gas debe expresarse en L y la presión en atm.* Alternativamente, ciertos cálculos requieren utilizar el valor de $R = 8,314 \text{ J/K mol}$, coherente con valores de *presión expresados en Pa*, y también puede utilizarse $R = 1,987 \text{ cal/K mol}$.

Así, un *gas ideal es un gas hipotético que cumple con la ley de los gases ideales bajo todas las condiciones.* Es importante mencionar que, hasta el momento hemos hecho un análisis macroscópico del comportamiento de los gases, por tanto, desde este punto de vista es que se ha definido un gas ideal. Abordaremos más adelante una perspectiva microscópica de estudio de los gases ideales.

A partir de la ecuación de estado puede comprobarse la afirmación realizada previamente respecto del volumen ocupado por un gas en CNPT:

$$V = \frac{1 \text{ mol} \times 0,0821 \frac{\text{L atm}}{\text{K mol}} \times 273 \text{ K}}{1 \text{ atm}}$$

$$V = 22,4 \text{ L}$$

Al efectuar cálculos con esta ecuación, resulta muy útil aplicar el **análisis dimensional** y comprobar que se utilizaron unidades coherentes entre sí para las variables del gas.

Ejercicio propuesto 9.8. Hasta hace algún tiempo los televisores contenían un tubo, denominado tubo de rayos. Estima la presión dentro de un tubo de un televisor sabiendo que el volumen del tubo es 5,0 L, la temperatura 23 °C y que contiene 0,010 mg de N₂.

La ecuación de estado puede expresarse de otras formas, muy útiles para determinar ciertas propiedades de gases en el laboratorio. Por ejemplo, si se considera un **gas puro**, se puede determinar su masa molar del siguiente modo:

$$P V = n R T = \frac{m}{M} R T$$

$$M = \frac{m R T}{P V} \quad [9.7]$$

Donde M es la masa molar en (g/mol). Se ha reemplazado en la ecuación los moles por el cociente entre la masa de gas (m), expresada en (g), y su masa molar. De este modo, si se tiene una masa de gas puro encerrado en un recipiente de volumen conocido, determinando su temperatura y presión, es posible conocer su masa molar con un grado de error aceptable.

La ecuación de estado del gas ideal también puede expresarse en términos de la densidad del gas, ρ :

$$P V = n R T = \frac{m}{M} R T$$

Reordenado:

$$P M = \frac{m}{V} R T = \rho R T$$

$$\rho = \frac{P M}{R T} \quad [9.8]$$

A partir de esta expresión, se deduce que la **densidad de un gas** depende no sólo de la temperatura y de su masa molar, como la densidad de líquidos y sólidos; sino que también **depende fuertemente de la presión** a la que está sometido. Esto es consecuencia de la naturaleza compresible de los gases.

El químico alemán Viktor Mayer (1848-1897) desarrolló un método que hace uso de esta expresión de la ecuación de estado para determinar la densidad de sustancias puras gaseosas y su masa molar. Gracias a su método, también es posible determinar la **fórmula molecular** de un gas puro si se conoce su **fórmula mínima** o **composición centesimal**⁵.

Ejercicio tipo 9.3. Se ponen en contacto 124 g de $\text{CaCO}_3(\text{s})$ y $\text{HCl}(\text{ac})$ en exceso para producir $\text{CO}_2(\text{g})$ con un rendimiento del 85,0%. El gas obtenido se recoge en un recipiente con pistón móvil a una temperatura de $23,0\text{ }^\circ\text{C}$ y presión atmosférica de 758 Torr. Calculá qué volumen de gas se recoge y qué densidad tendría en las condiciones del ejercicio y en CNPT.

Resolución

Para responder a estas incógnitas, debemos comenzar por plantear la ecuación química balanceada:



Por cada mol reaccionante de carbonato de calcio se produce un mol de $\text{CO}_2(\text{g})$, único producto gaseoso de la reacción. De acuerdo con el enunciado, el $\text{CaCO}_3(\text{s})$ limita la reacción, por lo tanto, podemos calcular los moles esperados de CO_2 a partir de la estequiometría de la reacción y la masa del reactivo:

$$100\text{ g de CaCO}_3 \rightarrow 1\text{ mol de CO}_2$$

$$124\text{ g CaCO}_3 \rightarrow x = 1,24\text{ moles de CO}_2\text{ (moles obtenidos si el rendimiento fuese de 100\%)}$$

$$100\text{ moles de CO}_2\text{ esperados} \rightarrow 85,0\text{ moles de CO}_2\text{ obtenidos}$$

$$1,24\text{ moles esperados} \rightarrow x = 1,05\text{ moles de CO}_2\text{ obtenidos}$$

Para conocer el volumen que ocupan estos moles se debe aplicar la ecuación de estado del gas ideal, considerando la presión y la temperatura a la que se encuentra el CO_2 , pero antes debemos transformar las unidades en las adecuadas para aplicarlas a la ecuación:

$$P = 758\text{ torr} \times \frac{1\text{ atm}}{760\text{ torr}} = 0,997\text{ atm}$$

$$T = 23,0^\circ\text{C} + 273 = 296\text{ K}$$

⁵ El método de Viktor Mayer puede consultarse en los siguientes enlaces: <https://www.youtube.com/watch?v=rJlsnnp2PCg>, <https://www.youtube.com/watch?v=XWvZXdVEm2s> y <https://www.youtube.com/watch?v=qX51zaEc9WU> (Mercader, 2015).

$$V = \frac{n R T}{P} = \frac{1,05 \text{ moles} \cdot 0,0821 \frac{\text{L atm}}{\text{K mol}} \cdot 296 \text{ K}}{0,997 \text{ atm}} = 25,7 \text{ L de CO}_2$$

Como se mencionó, la densidad de un gas puede calcularse a partir de la ecuación [9,8], teniendo en cuenta que la masa molar del CO₂ es 44,0 g/mol. Denominaremos ρ_1 a la densidad del CO₂ en las condiciones de temperatura y presión planteadas en el ejercicio (296 K y 0,997 atm) y ρ_2 a la densidad en CNPT (273,15 K y 1 atm).

$$\rho_1 = \frac{0,997 \text{ atm} \cdot 44,0 \text{ g/mol}}{0,0821 \frac{\text{L atm}}{\text{K mol}} \cdot 296 \text{ K}} = 1,81 \frac{\text{g}}{\text{L}}$$

$$\rho_2 = \frac{1,00 \text{ atm} \cdot 44,0 \text{ g/mol}}{0,0821 \frac{\text{L atm}}{\text{K mol}} \cdot 273,15 \text{ K}} = 1,96 \frac{\text{g}}{\text{L}}$$

El resultado de la densidad obtenida puede verificarse accediendo a valores de densidades de gases tabulados⁶.

Es posible vincular las densidades un gas determinado en distintas condiciones, haciendo el cociente de sus expresiones (R es una constante y M no cambia por tratarse del mismo gas):

$$\frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{P_1 M R T_2}{R T_1 P_2 M}$$

$$\frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{P_1 T_2}{T_1 P_2}$$

Así, si se conoce la densidad de un gas en determinadas condiciones (ρ_1) puede calcularse su densidad en otras (ρ_2) haciendo uso de la siguiente ecuación:

$$\frac{\rho_1 T_1}{P_1} = \frac{\rho_2 T_2}{P_2} \quad [9.9]$$

Es importante mencionar que, las unidades para la densidad de los gases se expresan habitualmente en **g/L** (ejercicio tipo 9.3), dando cuenta de su menor densidad respecto a

⁶ Tabla B-7, "Propiedades de gases a 1 atm de presión". Accesible en http://www.dicis.ugto.mx/profesores/jriesco/documentos/III06083%20MF_11%20Ap%C3%83%C2%A9ndices%20B%20y%20C_Tablas.pdf.

líquidos y sólidos (recordemos que en el capítulo 7 utilizamos las unidades g/mL para las soluciones líquidas).

Ejercicio propuesto 9.9. El aceite producido por las hojas de eucalipto contiene un compuesto volátil denominado eucaliptol. Este compuesto se usa en enjuagues bucales, en inhaladores para aliviar la congestión nasal, en cremas para tratar dermatitis, y en otras aplicaciones medicinales. A 190 °C y 60,0 torr una muestra de vapor de eucaliptol tiene una densidad de 0,320 g/L. Calculá la masa molar del eucaliptol.

Comportamiento de mezclas gaseosas

El comportamiento de mezclas de distintos gases puede describirse a partir de la ecuación de estado del gas ideal, al igual que se hace con sustancias gaseosas puras.

Al estudiar el comportamiento del aire, conociendo que se trataba de una **mezcla** de sustancias gaseosas, John Dalton (1766-1844) encontró que *la presión total de una mezcla de gases es igual a la suma de las presiones que cada gas ejercería si estuviera presente solo*. Esta observación se conoce como **ley de Dalton de las presiones parciales**, y da cuenta de que cada gas que compone una mezcla se comporta de forma independiente de los otros gases presentes (esto es estrictamente válido para gases que se comportan idealmente). La presión ejercida por una especie gaseosa Q en una mezcla se denomina **presión parcial** de Q, P_Q , y la **presión total** P_T del sistema es la suma de las presiones parciales de sus gases componentes (Q, Z, Y, etc.):

$$P_T = P_Q + P_Y + P_Z + \dots \quad [9.10]$$

Al aplicar la ecuación de estado a cada componente de una mezcla de dos gases, Q e Y, se obtiene:

$$P_Q = \frac{n_Q R T}{V}$$

$$P_Y = \frac{n_Y R T}{V}$$

Notar que, como el recipiente que contiene a ambos gases es el mismo, su volumen y temperatura son idénticos. Al relacionar las expresiones de la presión parcial de cada componente y la presión de la mezcla completa:

$$\frac{P_Q}{P_T} = \frac{\frac{n_Q R T}{V}}{\frac{n_T R T}{V}}$$

$$\frac{P_Q}{P_T} = \frac{n_Q}{n_T} = x_Q \quad [9.11]$$

El cociente n_Q/n_T es la fracción molar de Q en la muestra, x_Q , unidad de concentración que se estudió en el capítulo 7. Reordenando, se puede expresar la ley de Dalton de la siguiente forma:

$$P_Q = X_Q P_T \quad \text{y} \quad P_Y = X_Y P_T \quad [9.12]$$

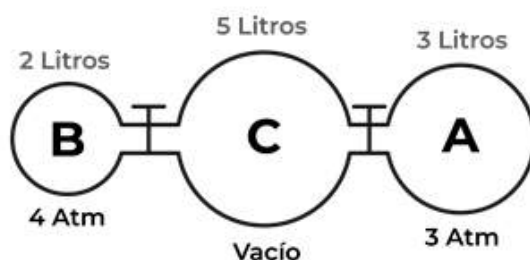
Recordando que el aire se compone en un 78,0% de nitrógeno y en un 20,9% de oxígeno y trazas de dióxido de carbono (0,4 %) es posible calcular que, en el aire atmosférico a nivel del mar, la presión ejercida por cada uno de estos gases es:

$$P_{N_2} = 0,780 \times 760 \text{ mm Hg} = 593 \text{ mm Hg}$$

$$P_{O_2} = 0,209 \times 760 \text{ mm Hg} = 159 \text{ mm Hg}$$

$$P_{CO_2} = 0,0004 \times 760 \text{ mm Hg} = 0,3 \text{ mm Hg}$$

Ejercicio tipo 9.4. Se tiene un sistema como el ilustrado en la figura. En el balón B hay gas nitrógeno a 4 atm de presión y el balón A contiene gas metano a 3 atm. El balón central C conecta a ambos recipientes y se encuentra originalmente vacío. Al abrir las llaves de paso, se produce la mezcla sin reacción de los gases, ¿cuál es la presión total de la mezcla?



Resolución

En este caso es posible utilizar la ley de Dalton y las leyes de los gases combinadas para conocer la presión de la mezcla final. La mezcla se produce sin reacción y a temperatura constante, por lo que n y T son constantes durante el proceso; las variables serán P y V , ya que al mezclarse ambos gases pasan a ocupar todo el volumen disponible en este sistema. A continuación, se resumen las condiciones iniciales y finales:

	Nitrógeno (balón B)	Metano (balón A)
Inicial	$P_{N_2,i} = 4 \text{ atm}$ $V_{N_2,i} = 2 \text{ L}$	$P_{CH_4,i} = 3 \text{ atm}$ $V_{CH_4,i} = 3 \text{ L}$
Final	$P_{N_2,f} = ?$ $V_{N_2,f} = 2 + 5 + 3 = 10 \text{ L}$	$P_{N_2,f} = ?$ $V_{CH_4,f} = 2 + 5 + 3 = 10 \text{ L}$

Notar que el volumen final que ocupa cada gas incluye al balón central C que antes estaba vacío, y ambos gases ocupan todo el volumen disponible, 10 L, dada su propiedad de expandirse.

Es posible aplicar la ley de Boyle-Mariotte (T y n constantes) para averiguar la presión parcial final de cada gas:

$$P_{N_2,i} \times V_{N_2,i} = P_{N_2,f} \times V_{N_2,f} \qquad P_{CH_4,i} \times V_{CH_4,i} = P_{CH_4,f} \times V_{CH_4,f}$$

$$P_{N_2,f} = \frac{4 \text{ atm} \times 2 \text{ L}}{10 \text{ L}} = 0,8 \text{ atm}$$

$$P_{CH_4,f} = \frac{3 \text{ atm} \times 3 \text{ L}}{10 \text{ L}} = 0,9 \text{ atm}$$

Como la ley de Dalton indica que la presión de la mezcla es igual a la suma de las presiones parciales de sus componentes:

$$P_T = P_{N_2,f} + P_{CH_4,f} = 0,8 \text{ atm} + 0,9 \text{ atm} = \mathbf{1,7 \text{ atm}}$$

La presión final de la mezcla gaseosa es 1,7 atm. Este resultado es coherente, ya que los gases pasan a ocupar un volumen mayor que el ocupado inicialmente; por lo tanto, la presión que ejercen esos moles gaseosos será menor a su presión inicial.

Ejercicio propuesto 9.10. Lxs buceadorxs que exploran un naufragio utilizan una nueva mezcla de gases Ne y O₂ que contiene 141,2 g de O₂ y 335,0 g de Ne. La presión de los tanques es 50,0 atm. Calculá la presión parcial de O₂.

Teoría cinética-molecular: una mirada microscópica sobre los gases

La ecuación de estado describe macroscópicamente (a través de variables fácilmente medibles) cómo se comportan los gases ideales, pero no brinda una mirada molecular que explique por qué lo hacen de modo tan distinto a los otros estados de la materia. Durante muchos años, científicos de diferentes partes del mundo intentaron explicar su comportamiento observado a través de un **modelo** que pensara estos sistemas a nivel atómico y molecular (microscópico).

Fue así como, tras aproximadamente 100 años de trabajo mancomunado, en 1857 se publicó la **teoría cinética-molecular** de los gases (teoría C-M). Este modelo describe cómo se mueven las partículas gaseosas (átomos, moléculas) a través de una serie de postulados:

- 1) *Los gases consisten en grandes cantidades de moléculas que están en **continuo movimiento aleatorio**. En el caso de los gases nobles y otros gases monoatómicos, se habla de átomos en movimiento.*
- 2) *El **volumen de todas las moléculas (átomos) del gas es insignificante** o despreciable en comparación con el volumen total en el que está contenido el gas. Podemos imaginar que las partículas gaseosas están separadas entre sí por distancias importantes, y que el espacio entre ellas está vacío.*
- 3) *Las **fuerzas de atracción y repulsión** entre las partículas **son despreciables**.*
- 4) *Los **choques** entre las partículas de gas y entre éstas con las paredes del recipiente son **perfectamente elásticos**. Esto quiere decir que, si bien puede ocurrir transferencia de energía entre las moléculas durante los choques, la **energía cinética promedio** del sistema se conserva.*
- 5) *La **energía cinética promedio** de las moléculas (átomos) es proporcional a la temperatura absoluta. A cualquier **temperatura dada**, las **moléculas de todos los gases tienen la misma energía cinética promedio**.*

Al imaginar un gas a partir de las premisas de este modelo, es posible explicar algunas de las observaciones experimentales que derivaron en las leyes de los gases y la ecuación de estado del gas ideal. Es decir, el **modelo macroscópico** y el **modelo microscópico** son miradas diferentes de los sistemas gaseosos que guardan coherencia entre sí y llevan a **predicciones similares**.

La teoría C-M interpreta a la presión ejercida por un gas como consecuencia de los múltiples **choques de las partículas gaseosas contra las paredes** del recipiente que las contiene. La magnitud de la presión dependerá tanto de la frecuencia como de la fuerza de esos choques.

La temperatura absoluta en términos microscópicos se interpreta como la **energía cinética promedio** de las partículas gaseosas. Si dos masas de diferentes gases se encuentran a la misma temperatura, sin importar la identidad de los gases, sus moléculas o átomos tendrán la misma energía cinética promedio.

A partir de la teoría C-M podemos interpretar por qué la ley de los gases ideales se ajusta al comportamiento de los gases reales a bajas presiones y altas temperaturas. Si la presión a la que se encuentra un gas real es baja, podemos suponer que sus partículas están lo suficientemente separadas para no atraerse ni repelerse entre sí (postulado 3); además es razonable asumir que el volumen que ocupan es despreciable frente al del recipiente que las contiene (postulado 2). Si la temperatura a la que se encuentra un gas real es lo suficientemente alta, se podría pensar que la energía cinética de las partículas lograría vencer las interacciones entre ellas, tal como supone el postulado (3) de esta teoría.

Si imaginamos la misma cantidad de moles gaseosas distribuidos en dos recipientes a idéntica temperatura, uno de ellos de 2 L y el otro de 10 L, de acuerdo con la ley de Boyle-Mariotte el gas contenido en 2 L tendrá una presión superior al contenido en 10 L. Esto puede interpretarse desde una mirada microscópica. Si bien, la fuerza de los choques de las partículas contra las paredes del recipiente será la misma en ambos gases (a igual temperatura, igual energía cinética promedio de las partículas), un gas contenido en un volumen menor chocará con las paredes del recipiente muchas más veces por unidad de tiempo, ya que las distancias que debe recorrer una partícula gaseosa antes de encontrar la pared son relativamente más cortas. Así, la frecuencia de los choques será superior para el gas contenido en un volumen menor, resultando una presión mayor.

Consideremos una masa de gas contenida en un recipiente rígido, su volumen y su número de partículas permanecerán constantes. Supongamos que dicho gas se calienta, aumentando la temperatura; la ley de Gay-Lussac predice que su presión también aumentará. Si se analiza desde la teoría C-M, al entregar calor a las partículas gaseosas, éste se traduce en un aumento de la energía cinética promedio, es decir, un aumento de su velocidad. Al aumentar la velocidad sin modificación de las distancias que deben recorrer las partículas (volumen constante), se elevará la frecuencia con que chocan con las paredes del recipiente. Por otro lado, una mayor energía cinética promedio también se traduce en una fuerza de choque mayor. Por estos motivos, la presión de la masa gaseosa es mayor al aumentar la temperatura. Nuevamente, los modelos macroscópico y microscópico para gases permiten arribar a idénticas predicciones.

Ejercicio propuesto 9.11. Explica la ley de Charles en base a los postulados de la teoría C-M (mirada microscópica).

Como se mencionó, la temperatura de un gas se relaciona con la energía cinética promedio de sus partículas, pero ¿qué significa promedio? La energía cinética de una partícula ($\langle e_c \rangle$) se refleja en la velocidad a la que se mueve. No todas las partículas que componen un gas tienen la misma velocidad, y es imposible conocer esta magnitud para cada una. Durante un choque entre partículas, puede ocurrir que una de ellas sea expulsada a gran velocidad mientras que la otra queda casi detenida luego del impacto; la energía cinética no se ha perdido sino que ha sido transferida de la segunda a la primera partícula. Como resultado, si bien es posible definir una velocidad promedio de las partículas de una masa gaseosa, cada partícula individual se mueve con una velocidad propia, existiendo una amplia diversidad de velocidades en el conjunto.

A partir del estudio de la distribución de velocidades de un gas a distintas temperaturas, se ha definido la **velocidad cuadrática media** (v_{cm}) como la velocidad que tiene una partícula que posee la energía cinética promedio, $\langle e_c \rangle$. Esta velocidad no es exactamente igual a la velocidad promedio, pero la diferencia entre ambas es pequeña ($v_{cm} \simeq \langle v \rangle$).

La energía cinética promedio está relacionada con la velocidad cuadrática media del siguiente modo:

$$\langle e_c \rangle = \frac{1}{2} m v_{cm}^2 \quad [9.13]$$

Donde m es la masa de la partícula (molécula o átomo). Como la masa es invariable frente a los cambios de temperatura, el aumento de la energía cinética cuando se aumenta T necesariamente es reflejo de un incremento de la velocidad, v_{cm} .

Difusión de gases

A partir de los postulados de la teoría C-M, se afirma que dos masas de gas que se encuentran a la misma temperatura poseen la misma energía cinética promedio, $\langle e_c \rangle$, independientemente de que la identidad de los gases sea o no la misma. Entonces, un gas liviano como el H_2 a 298 K tiene la misma $\langle e_c \rangle$ que un gas pesado como el xenón, Xe, a 298 K:

$$\langle e_c \rangle_{H_2, 298 K} = \langle e_c \rangle_{Xe, 298 K}$$

$$\frac{1}{2} m_{H_2} v_{cm, H_2}^2 = \frac{1}{2} m_{Xe} v_{cm, Xe}^2$$

$$\frac{v_{cm, H_2}}{v_{cm, Xe}} = \sqrt{\frac{m_{Xe}}{m_{H_2}}} = \sqrt{\frac{M_{Xe}}{M_{H_2}}} \quad [9.14]$$

Al observar la expresión desarrollada de la $\langle e_c \rangle$ de cada gas, como $m_{H_2} < m_{Xe}$, para cumplir con la igualdad matemática debe ocurrir que $v_{cm, H_2} > v_{cm, Xe}$. Es decir, un gas más liviano que se encuentra a idéntica temperatura que un gas más pesado se moverá con mayor velocidad. En la ecuación [9.14], se ha transformado el cociente de las masas de Xe e H_2 , en el cociente de sus masas molares, M_{Xe} y M_{H_2} , multiplicando y dividiendo cada masa por el número de Avogadro, lo que no altera la ecuación.

Esta relación de dependencia tiene efectos sobre los fenómenos de difusión y efusión de los gases. La **efusión** es el escape de las partículas de un gas a través de un agujero diminuto hacia un espacio vacío o de menor presión. Un ejemplo podría ser el de un globo, cuya presión interior es mayor que la presión atmosférica externa, y que se desinfla lentamente a través de los poros del material que lo compone. La **difusión** es la dispersión de una sustancia dentro de un espacio o dentro de una segunda sustancia; como la esencia para ambientes, que difunde dentro de una habitación y dentro del aire de la habitación.

En 1846, Thomas Graham (1805-1869) descubrió empíricamente que, *a una temperatura constante, la velocidad de efusión de un gas es inversamente proporcional a la raíz cuadrada de su masa molar*. La **ley de Graham** puede expresarse como:

$$v_{ef} \propto \sqrt{\frac{1}{M}}$$

Así, para dos gases 1 y 2, con masa molares M_1 y M_2 , esta ley se expresa:

$$\frac{v_{ef,1}}{v_{ef,2}} = \sqrt{\frac{M_2}{M_1}} \quad [9.15]$$

La ecuación [9.15] coincide con la deducida a partir de la teoría C-M, ecuación [9.14].

Ejercicio propuesto 9.12. Se desea obtener un producto para perfumar ambientes. Para ello se dispone de dos sustancias volátiles aromáticas. Una de ellas posee un aroma cítrico, asociado al limoneno ($C_{10}H_{16}$), y la otra tiene un perfume floral, debido al linalool ($C_{10}H_{18}O$). ¿Cuál de las sustancias elegirías para obtener la fórmula más eficaz para aromatizar grandes espacios?

Respuestas de los ejercicios propuestos

Ejercicio propuesto 9.1.

La presión que soporta una persona sumergida en el mar a 40,00 m es 377,3 cm Hg.

Ejercicio propuesto 9.2.

La rama abierta a la atmósfera tendrá un nivel de mercurio por debajo del nivel de la rama del manómetro conectada al balón que contiene un gas de presión inferior a la presión atmosférica.

Ejercicio propuesto 9.3.

mm Hg	cm Hg	Torr	kPa	atm	mbar
758,5	75,85	758,5	101,1	0,9980	1011
742,8	74,28	742,8	99,03	0,9774	990,3
762,2	76,22	762,2	101,7	1,003	1016
1489	148,8	1489	198,54	1,959	1985
859,0	85,90	859,0	114,5	1,130	1145
1140	114,0	1140	152,0	1,500	1520

Ejercicio propuesto 9.4.

La presión final es de 5,00 atm.

Ejercicio propuesto 9.5.

El volumen pulmonar será de 1,2 L.

Ejercicio propuesto 9.6.

Si la lata se calienta a 450 °C, la presión en su interior será de 3,6 atm.

Ejercicio propuesto 9.7.

La cámara contiene $8,7 \times 10^3$ moles de gas; $5,2 \times 10^{27}$ moléculas de gas; $7,9 \times 10^{25}$ moléculas de etileno. El 2,0% de O_2 en la cámara representa $1,0 \times 10^{26}$ moléculas de oxígeno. Para alcanzar una concentración final de 12% se inyectarán $1,9 \times 10^4$ L de oxígeno.

Ejercicio propuesto 9.8.

La presión dentro del tubo es $1,7 \times 10^{-6}$ atm.

Ejercicio propuesto 9.9.

La masa molar del eucaliptol es 154 g/mol.

Ejercicio propuesto 9.10.

La presión parcial del oxígeno en la mezcla es 10,5 atm.

Ejercicio propuesto 9.11.

Consideremos que se tiene una cantidad fija de gas, en un recipiente cerrado con una tapa móvil (pistón) sobre la que se ejerce una presión constante igual a la atmosférica. Se procede a aumentar la temperatura del gas, con lo cual sus moléculas chocan con las paredes del recipiente con mayor frecuencia y fuerza, empujando la tapa móvil del recipiente, lo que provoca finalmente el aumento del volumen ocupado por el gas. Esta expansión continuará hasta que la presión del gas se equilibre con la presión atmosférica ejercida sobre la tapa móvil del recipiente ($P_{\text{final}} = P_{\text{inicial}} = \text{constante}$). En términos microscópicos, si bien la energía cinética

de las partículas es mayor luego de aumentar la temperatura, también lo es la distancia que deben recorrer hasta chocar con la pared del recipiente, manteniendo la frecuencia de choques (presión) constante.

Ejercicio propuesto 9.12.

El limoneno, sustancia más liviana, difundirá con mayor velocidad y será más eficiente para perfumar ambientes.

Referencias

- Área Físicoquímica. Udelar. (5 de agosto de 2019). Barómetro de Fortin - Descripción y uso. Recuperado de <https://www.youtube.com/watch?v=UHK5zeQepDs>
- FAO. (2021). Global Livestock Environmental Assessment Model (GLEAM). Recuperado de <http://www.fao.org/gleam/results/en/>
- Fundación Vida Sostenible. (4 de mayo de 2015). Metano, vacas y cambio climático. Recuperado de <https://www.vidasostenible.org/metano-vacas-y-cambio-climatico/>
- Gibbens, S. (5 de noviembre de 2020) ¿Pueden eliminarse los eructos de metano de las vacas mediante la cría selectiva? *National Geographic*. Recuperado de <https://www.nationalgeographic.es/medio-ambiente/2019/07/eliminar-eructos-metano-vacas-cria-selectiva>
- Ibáñez, I. (8 de septiembre de 2019). Fracasa el invento para aprovechar el metano de las vacas. *Sur*. Recuperado de <https://www.diariosur.es/sociedad/ciencia/fracasa-invento-aprovechar-20190903192237-nt.html>
- Mercader, A. (6 de julio de 2015). Método Víctor Meyer: descripción del equipo. Recuperado de <https://www.youtube.com/watch?v=rJlsnnp2PCg>
- Mercader, A. (6 de julio de 2015). Método Víctor Meyer para la determinación del Peso Molecular. Recuperado de <https://www.youtube.com/watch?v=XWvZXdVEm2s&t=105s>
- Mercader, A. (6 de julio de 2015). Método Víctor Meyer: cálculos. Recuperado de https://www.youtube.com/watch?v=qX51zaEc9WU&list=PLS-nwZZz7xut0EYLQ27uSfFP2_3LoRzfv&index=2
- Viñas, J. M. (13 de enero de 2019). Los codos de Torricelli. Recuperado de <https://www.tiempo.com/noticias/divulgacion/los-codos-de-torricelli.html>
- Watts, G. (29 de septiembre de 2019). Las sorprendentes maneras para reducir los gases contaminantes que producen las vacas. *BBC News Mundo*. Recuperado de <https://www.bbc.com/mundo/vert-fut-49557404#>

Lxs autorxs

Barraqué, Facundo

Licenciado en Química de la Universidad Nacional de La Plata y Doctor en Ingeniería, mención materiales de la Universidad Tecnológica Nacional. Actualmente investigador postdoctoral en el Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica y ayudante diplomado de la cátedra Introducción a la Química y Química general (FCE-UNLP). Autor y coautor de 7 publicaciones en el área de la síntesis y caracterización de materiales para su utilización como adsorbentes de contaminantes. Autor del artículo “La enseñanza de la química durante el primer año de la universidad: el estudiante como protagonista de un aprendizaje significativo” (Educación Química 2020). Participante de numerosos eventos científicos-tecnológicos y organizador de actividades de divulgación científica para estudiantes de escuelas secundarias.

Briand, Laura Estefanía

Licenciada en Química (egresada de la Universidad Nacional del Litoral) y Doctora en Química de la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata. En la actualidad es Profesora Adjunta de la Cátedra de Introducción a la Química y Química General de la Facultad de Ciencias Exactas, Investigadora Principal del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas CONICET y Vicedirectora del Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas “Dr. Jorge J. Ronco”. Es autora de 82 publicaciones científicas en revistas internacionales, 90 comunicaciones a congresos, 8 capítulos de libros y 7 patentes de invención en tecnologías catalíticas. Diseño e implementó el curso con estrategias alternativas para la enseñanza de introducción a la química y química general CEAEQ junto con la Prof. Dra. Virginia Vetere.

Sampaolesi, Sofía

Licenciada en Biotecnología y Biología Molecular y Doctora de la Facultad de Ciencias Exactas (área Ciencias Biológicas) de la Universidad Nacional de La Plata (FCEX, UNLP), tesis aprobada con mención especial (2020). Especialista en Docencia Universitaria de la UNLP (2019). Actualmente se desempeña como becaria posdoctoral CONICET en el campo de la catálisis química. Es Jefa de Trabajos Prácticos de las cátedras de Introducción a la Química y Química General y Ayudante Diplomada de Química Analítica Instrumental (FCEX, UNLP). Ha publicado 3 artículos en revistas científicas internacionales y 15 trabajos en congresos nacionales e internacionales de su disciplina. Asimismo, ha publicado 2 artículos en revistas y 6 trabajos en congresos del

campo de la Enseñanza, y participó de la producción del Manual Digital de Laboratorio para cursos de química universitaria básica. Ha sido codirectora y coordinadora de proyectos de Extensión de la FCEX, UNLP.

Vetere, Virginia

Licenciada en Química y Doctora de la Facultad de Ciencias Exactas (área Química) de la Universidad Nacional de La Plata (FCEX, UNLP). En la actualidad es Profesora Adjunta de la Cátedra de Introducción a la Química y Química General (FCEX, UNLP). Es autora de numerosos trabajos científicos en el área de la catálisis y en la educación. Es responsable de un proyecto de extensión universitaria relacionado a la calidad de agua de consumo (FCEX, UNLP) e Investigadora Independiente del CONICET en el área de catálisis. Se ha capacitado en docencia universitaria y en perspectiva de género. Ha recibido la distinción Dr. Joaquín V. González a los mejores promedios de egresado de la FCEX de la UNLP, otorgado en 2003 por la Municipalidad de La Plata, y el Premio a la Joven Investigadora en Catálisis, otorgado en 2009 por la Sociedad Argentina de Catálisis.

Introducción a la Química : curso con estrategias alternativas para la enseñanza de la Química CEAEQ / Laura Estefanía Briand... [et al.] ; coordinación general de Laura Estefanía Briand ; Virginia Vetere.- 1a ed.- La Plata : Universidad Nacional de La Plata ; EDULP, 2022.

Libro digital, PDF - (Libros de cátedra)

Archivo Digital: descarga
ISBN 978-950-34-2204-5

1. Química. 2. Educación. 3. Educación Universitaria. I. Briand, Laura Estefanía, coord. II. Vetere, Virginia, coord.
CDD 540.7

Diseño de tapa: Dirección de Comunicación Visual de la UNLP

Universidad Nacional de La Plata – Editorial de la Universidad de La Plata
48 N.º 551-599 / La Plata B1900AMX / Buenos Aires, Argentina
+54 221 644 7150
edulp.editorial@gmail.com
www.editorial.unlp.edu.ar

Edulp integra la Red de Editoriales Universitarias Nacionales (REUN)

Primera edición, 2022
ISBN 978-950-34-2204-5
© 2022 - Edulp

e
exactas

**Edulp**
EDITORIAL DE LA UNLP



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA