

REACK

Ecuaciones químicas: ajuste y cálculos estequiométricos

The screenshot shows the REACK software window titled "Reacciones químicas: ajuste y cálculos". It features a menu bar with "Archivo", "Datos", "Utilidades", and "Info". Below the menu is a toolbar with "Reacción", "importar", and "guardar" buttons. A large text box displays the chemical equation $A + B \rightarrow C + D$. To the right of this box are buttons for "Nueva", "Ajustar", and "Autoajuste".

The main workspace is divided into two sections: "Reactivos / Productos" and "Cadena reacción".

Reactivos / Productos: This section contains two columns. The "Reactivos" column has a yellow box for the chemical formula, and the "Productos" column has a yellow box for the chemical formula. Between these columns are fields for "Inicial", "mol r.", "Final", "Obt.", and "mol". There are also "+" and "-" buttons between the columns.

Entrada/edición reactivo(s): A text box with a small upward arrow button.

Entrada/edición producto(s): A text box with a small upward arrow button.

Cadena reacción: A text box with an "ok" button and an example "(ej: H2+O2=H2O)".

Temas:

Reacciones: incorporar / editar.

Ajustar una reacción.

Cálculos basados en una reacción.

Problema.

Cálculo de concentraciones.

Reacciones: incorporar / editar.

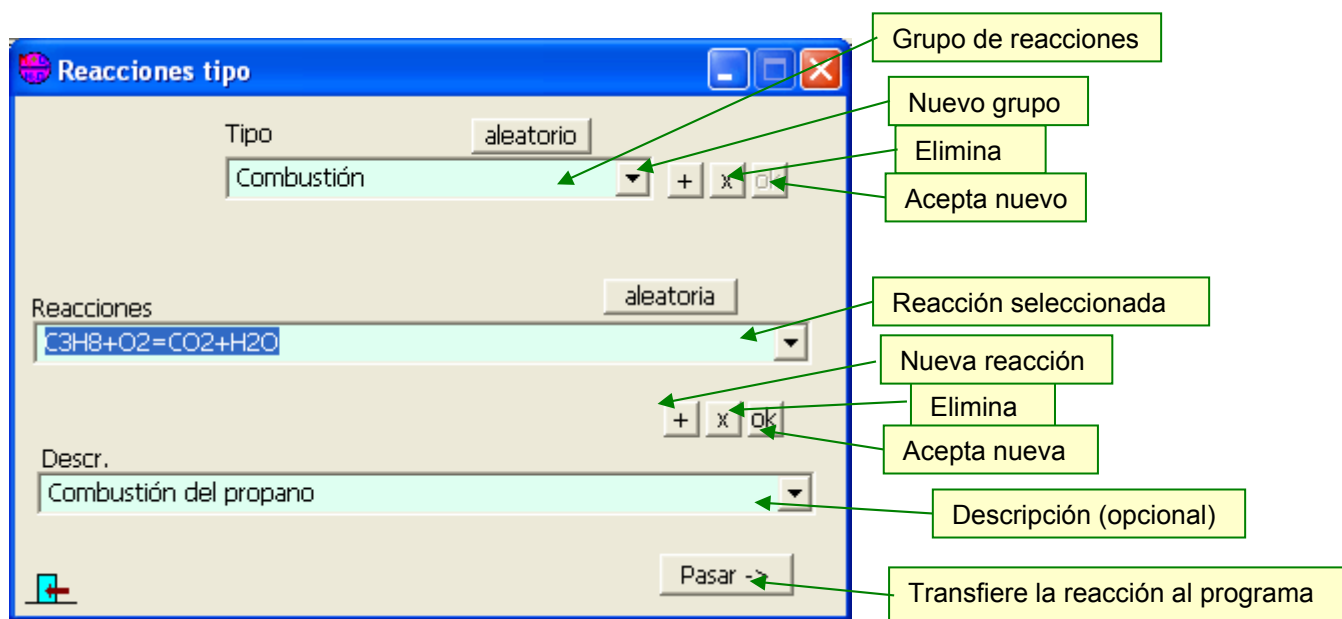
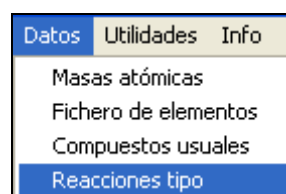
Sólo se tratará con reacciones “moleculares” (no iónicas parciales) y que contengan exclusivamente las fórmulas implicadas (no indicaciones de estado u otras)

- Incorporar reacciones tipo o “standard”
- Construir / editar manualmente una reacción

Incorporar reacciones tipo o “standard”

Seleccionando en el menú **Datos** la opción **Reacciones tipo...**

Se muestra la ventana que conecta con la base de datos de reacciones tipo



Como se puede ver, aquí también es posible añadir, modificar y eliminar reacciones y grupos de ellas.

Construir / editar manualmente una reacción

Introduciendo los reactivos y productos en sus casillas se incorporan a las listas formando así la reacción. También se puede introducir directamente la reacción.

$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$

Combustión del propano

Nueva Ajustar Autoajuste

Reactivos / Productos

Reactivos Inicial mol r. Final Productos Obt. mol

C3H8 O2 CO2 H2O

Entrada/edición reactivo(s) Entrada/edición producto(s)

C3H8+O2 CO2+H2O

Cadena reacción C3H8+O2=CO2+H2O ok (ej: H2+O2=H2O)

También se puede invocar la ventana de **compuestos usuales**, para introducir fórmulas:

Datos Utilidades Info

Masas atómicas

Fichero de elementos

Compuestos usuales

Reacciones tipo

Compuestos usuales

óxidos hidróxidos ácidos sales otros

H2O Na2O K2O Ag2O MgO CaO BaO ZnO

SnO2 NaOH KOH AgOH Mg(OH)2 Ca(OH)2 Ba(OH)2 Zn(OH)2

HCl HBr HI H2S H2SO4 HNO3 H2CO3

NaCl KCl AgCl MgCl2

Transferir Editar Suprimir Nuevo

Con las opciones:

Transferir a la lista de fórmulas de la reacción de la ventana principal

Editar el compuesto seleccionado

Suprimirlo

Nuevo: incorporar un nuevo compuesto

fórmula H2SO4 nombre ácido sulfúrico Ok

Ajustar una reacción

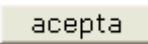
Una vez cargada o formada una reacción, hay que ajustar su ecuación para que refleje la proporción en moles de los compuestos que intervienen


- [Ajuste Manual](#)
- [Autoajuste](#)

Ajuste Manual: pulsando el botón 

Se despliegan las casillas para introducir los coeficientes de los reactivos y de los productos...



Una vez introducidos, pulsando el botón  el programa verificará el ajuste y lo dará por bueno o mostrará mensajes de error si no es correcto.

Autoajuste: Con el botón  el programa mismo calculará los coeficientes.

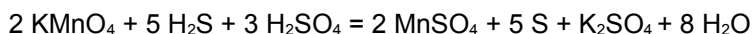
Desde el punto de vista del aprendizaje no es una opción aconsejable, pero será útil en el caso de querer pasar directamente a la fase de cálculos.

En cualquiera de los dos casos, se obtendrá la reacción ajustada:



Nota respecto al **autoajuste** de reacciones : el método utilizado es puramente matemático y, si bien raramente, en las reacciones Redox puede dar un resultado matemáticamente correcto pero químicamente erróneo: es decir, tal que el número de electrones cedidos por el reductor sea diferente del de captados por el oxidante. Un ejemplo:

La reacción $\text{KMnO}_4 + \text{H}_2\text{S} + \text{H}_2\text{SO}_4 = \text{MnSO}_4 + \text{S} + \text{K}_2\text{SO}_4 + \text{H}_2\text{O}$, ajustada por el método matemático da $2 \text{KMnO}_4 + 2 \text{H}_2\text{S} + 2 \text{H}_2\text{SO}_4 = 2 \text{MnSO}_4 + \text{S} + \text{K}_2\text{SO}_4 + 4 \text{H}_2\text{O}$, que cumple con la conservación de los átomos, pero ajustada por el método del ion-electrón da la ecuación químicamente real:



Cálculos basados en una reacción:

Una vez ajustada la ecuación química, pulsando el botón **Cálculos** se desplegarán las casillas de introducción de datos y presentación de resultados.

Se pueden introducir los datos de:

- Uno o más reactivos (si son más de uno, se calculará el reactivo limitante), o,
- Un producto (solamente, ignorándose los siguientes que puedan introducirse).

También se pueden elegir las unidades de las cantidades.

Reacciones químicas: ajuste y cálculos

Archivo Datos Utilidades Info

Reacción **importar** **guardar**

$\text{C}_3\text{H}_8 + 5 \text{O}_2 \longrightarrow 3 \text{CO}_2 + 4 \text{H}_2\text{O}$

Combustión del propano **Nueva** **Cálculos** **Autoajuste**

Cálculos sobre la reacción

Reactivos	Inicial	mol r.	Final	Productos	Obt.	mol
C3H8	100 g			CO2		
O2	200 L cn			H2O		

M.A.: C = 12.01, H = 1.008, O = 16.00

Rst **Calc** **Problema >**

Unidades C3H8

☒ gramc ☐ mol ☐ V disolución ☐ L cn

pureza 100 % M= 1 mol/L

☐ L = f(P, T) P: 1.00 atm T: 20.0 °C

Pulsando **Calc** tras la introducción de datos aparecerán los resultados en las casillas vacías:

Reacciones químicas: ajuste y cálculos

Archivo Datos Utilidades Info

Reacción **importar** **guardar**

$\text{C}_3\text{H}_8 + 5 \text{O}_2 \longrightarrow 3 \text{CO}_2 + 4 \text{H}_2\text{O}$

Combustión del propano **Nueva** **Cálculos** **Autoajuste**

Cálculos sobre la reacción

Reactivos	Inicial	mol r.	Final	Productos	Obt.	mol
C3H8	100 g	1.79	21.3g	CO2	236 g	5.36
O2	200 L cn	8.93	0.000L cn	H2O	129 g	7.14

M.A.: C = 12.01, H = 1.008, O = 16.00

Rst **Calc** **Problema >**

Unidades C3H8

☒ gramc ☐ mol ☐ V disolución ☐ L cn

pureza 100 % M= 1 mol/L

☐ L = f(P, T) P: 1.00 atm T: 20.0 °C

Problema: pulsando **Problema >** se mostrará un esquema de problema con los cálculos:

Problema

Archivo

Posible enunciado

El C₃H₈ reacciona con O₂ para dar: CO₂ y H₂O.
Si han intervenido 100 g de C₃H₈ y 200 L cn de O₂ calcula:
Los g de CO₂ y g de H₂O obtenidos.

Resolución

REACCIÓN: C₃H₈ + 5 O₂ = 3 CO₂ + 4 H₂O
=====

Datos:
C₃H₈: 100 g x 1 mol/44.10g = 2.27 mol
O₂: 200 L cn x 1 mol/22.4L = 8.93 mol / 5 -> 1.79 <- R.Limitante

Resultados:

REACTIVO	moles reac.	- cantidad	exceso (=ini-reac.)
C ₃ H ₈	1.79 x 1 = 1.79	1.79 x 44.10g/mol = 78.7g	-> 21.3 g final

PRODUCTO	moles formados	cantidades
CO ₂	1.79 x 3 = 5.36	x 44.01g/mol = 236 g
H ₂ O	1.79 x 4 = 7.14	x 18.02g/mol = 129 g

El problema se puede guardar en modo texto en un fichero.

Si ya existe se le añadirá el problema y si no, se creará.

Problema

Archivo

- Guardar problema
- Ver fichero
- Salir

Guardar la reacción utilizada:

Una reacción nueva introducida se puede incorporar a la relación de reacciones tipo pulsando **guardar**

GUARDAR REACCIÓN

Seleccionar TIPO
o crear + **ok**

Tipo: aleatorio
Combustión + x **ok**

Reacciones: aleatoria
C₆H₅CH₃+O₂=CO₂+H₂O

opcional: introducir Descripción
Aceptar con **ok** + x **ok**

Descr.: Combustión tolueno

Pasar ->

Cálculo de concentraciones

Opción elegible en el menú Utilidades.

Eligiendo un compuesto de la lista permite calcular, a partir de los datos de preparación de la disolución, las diferentes expresiones de concentración.

O, sin datos de preparación, la conversión de una expresión de concentración a las demás posibles (todas, si se sabe la densidad).

Utilidades	Info
Cálculo concentraciones	
Edición utilidades	
Bloc de notas	
Calculadora Windows	

Concentración de disoluciones

Archivo

Compuesto: HCl MM: 36.46

Densidad disolución: 1.06 g/ml

Preparación:

- g soluto: 50
- ml disolución: 500
- g disolvente: 480

Concentración:

- Molaridad: 2.74
- molalidad: 2.86
- g/l: 100
- % en masa: 10.4

ok Calc

Convertir una forma de concentración a las demás: Introducirla y pulsar **Calc**

Cualquier comentario o consulta se puede enviar a:

jog@scialt.com

O visitar la página web: <http://www.scialt.com/es>