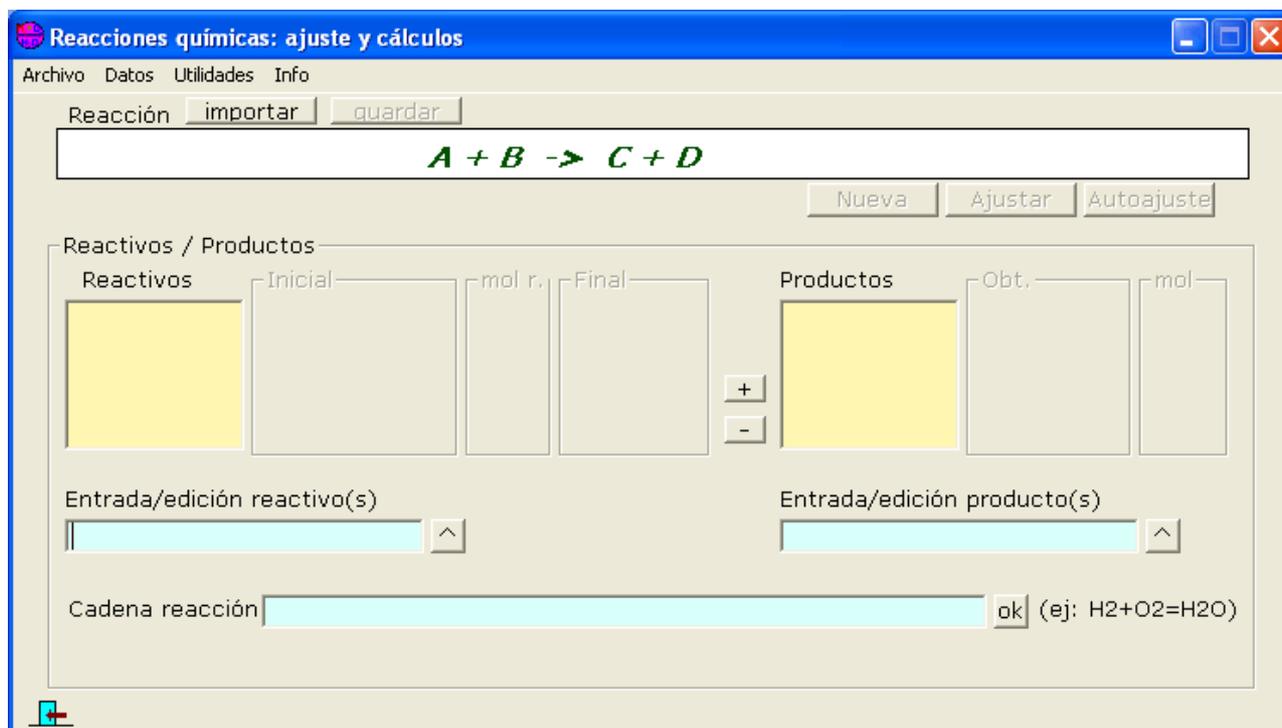


REACK

Ecuaciones químicas: ajuste y cálculos estequiométricos



Temas:

Reacciones: incorporar / editar.

Ajustar una reacción.

Cálculos basados en una reacción.

Problema.

Cálculo de concentraciones.

Reacciones: incorporar / editar.

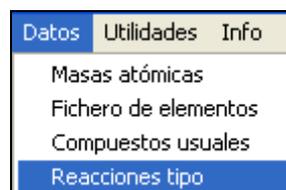
Sólo se tratará con reacciones “moleculares” (no iónicas parciales) y que contengan exclusivamente las fórmulas implicadas (no indicaciones de estado u otras)

- 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



The 'Reacciones tipo' dialog box is shown with several annotations:

- Grupo de reacciones:** Points to the 'Tipo' dropdown menu.
- Nuevo grupo:** Points to the '+' button next to the 'Tipo' dropdown.
- Elimina:** Points to the 'x' button next to the 'Tipo' dropdown.
- Acepta nuevo:** Points to the 'ok' button next to the 'Tipo' dropdown.
- Reacción seleccionada:** Points to the 'Reacciones' dropdown menu.
- Nueva reacción:** Points to the '+' button next to the 'Reacciones' dropdown.
- Elimina:** Points to the 'x' button next to the 'Reacciones' dropdown.
- Acepta nueva:** Points to the 'ok' button next to the 'Reacciones' dropdown.
- Descripción (opcional):** Points to the 'Descr.' dropdown menu.
- Transfiere la reacción al programa:** Points to the 'Pasar ->' button.

The dialog box contains the following fields:

- Tipo:** aleatorio (button), Combustión (dropdown)
- Reacciones:** aleatoria (button), C₃H₈+O₂=CO₂+H₂O (dropdown)
- Descr.:** Combustión del propano (dropdown)
- Pasar ->** (button)

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.

C₃H₈ + O₂ → CO₂ + H₂O

Combustión del propano

Nueva Ajustar Autoajuste

Reactivos / Productos

Reactivos Inicial mol r. Final Productos Obt. mol

C3H8 O2 CO2 H2O

Entrada/edición reactivo(s) C3H8+O2

Entrada/edición producto(s) 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 SnO₂ NaOH KOH AgOH Mg(OH)₂ Ca(OH)₂ Ba(OH)₂ Zn(OH)₂

hidróxidos H₂O Na₂O K₂O Ag₂O MgO CaO BaO ZnO

ácidos HCl HBr HI H₂S H₂SO₄ HNO₃ H₂CO₃

sales NaCl KCl AgCl MgCl₂

otros

Transferir

Editar

Suprimir

Nuevo

Con las opciones:

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

Editar el compuesto seleccionado

fórmula H₂SO₄ nombre ácido sulfúrico Ok

Suprimirlo

Nuevo: incorporar un nuevo compuesto

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...

Reacción

C_3H_8 + O_2 \longrightarrow CO_2 + H_2O

Combustión del propano

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:

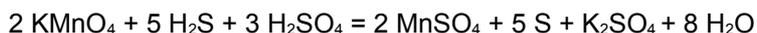
Reacción

C_3H_8 + 5 O_2 \longrightarrow 3 CO_2 + 4 H_2O

Combustión del propano

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

$C_3H_8 + 5 O_2 \longrightarrow 3 CO_2 + 4 H_2O$

Combustión del propano

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

Unidades C3H8

gramc mol V disolución L cn

pureza 100 % M= 1 mol/L 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

$C_3H_8 + 5 O_2 \longrightarrow 3 CO_2 + 4 H_2O$

Combustión del propano

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

Unidades C3H8

gramc mol V disolución L cn

pureza 100 % M= 1 mol/L 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	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: Introducir y pulsar **Calc**

Cualquier comentario o consulta se puede enviar a:

jog@scialt.com

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