

Profesor Cátedra: Sr. Ricardo Letelier

Profesor Auxiliar: Magín Torres

Estequeometría

Generalidades

La estequeometría consiste en cuantificar la cantidad de material producido y consumido en una reacción química, de modo de establecer una relación entre la cantidad de reactantes consumidos y de productos generados.

La unidad básica es el mol. Un mol es la cantidad de átomos en 12 gramos de Carbono¹² puro. Espectrometría de masas, técnica que cuenta los átomos de forma precisa, ha determinado éste número y se conoce como *Número de Avogadro* y su valor es 6.02×10^{23} . Es decir ésta es la cantidad de átomos que existen en un mol de cualquier elemento.

Un compuesto químico es una colección de átomos. Por ejemplo el Metano (CH_4) consiste en 4 átomos de Hidrógeno ($\text{PA}=1.008$ [gr/mol]) y un átomo de Carbono ($\text{PA}=12$ [gr/mol]). Entonces *Peso Molecular* del Metano será $4 \times (1.008) + 12 = 16.04$ [gr/mol]. Un mol de metano pesará 16 [gr], a esto se le conoce como *Masa Molar*.

Otro concepto es el cálculo de porcentajes de un determinado elemento en un compuesto. Por ejemplo la Calcopirita (CuFeS_2), la Bornita (Cu_5FeS_4) y la Calcosina (Cu_2S) son menas de Cobre (minerales de los cuales se extrae el Cobre). Uno posee mejor ley que los otros. Si $\text{PA}(\text{Cu})=63.55$ [gr/mol], $\text{PA}(\text{Fe})=55.85$ [gr/mol], $\text{PA}(\text{S})=32.06$ [gr/mol]. El porcentaje de Cobre en cada mineral será:

$$\text{CuFeS}_2 = \frac{63.55}{63.55 + 55.85 + 2 \cdot 32.06} \cdot 100\% = 34.63\%$$

$$\text{Cu}_5\text{FeS}_4 = \frac{5 \cdot 63.55}{5 \cdot 63.55 + 55.85 + 4 \cdot 32.06} \cdot 100\% = 63.32\%$$

$$\text{Cu}_2\text{S} = \frac{2 \cdot 63.55}{2 \cdot 63.55 + 32.06} \cdot 100\% = 79.86\%$$

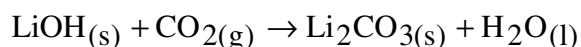
Entonces el que posee mayor ley es la Calcosina (Cu_2S).

Las reacciones químicas involucran una reorganización de los átomos en una o más sustancias. Por generalidad identificamos en una ecuación a los reactantes o reactivos (lado izquierdo) y a los productos (lado derecho).

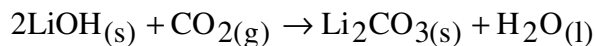
Para balancear éstas ecuaciones (debe existir la misma cantidad de moles al inicio y al final). Cuando balanceamos la ecuación, siempre partimos de la molécula más complicada (ya sea porque tiene un elemento raro o porque posee la mayor cantidad de átomos), luego ajustamos las otras cantidades multiplicando por un número entero o una fracción. En lo ideal, siempre queden con números enteros al final (multiplicar por factor común). Ejemplo: En la combustión del etanol: $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$, primero vemos la molécula más complicada (etanol $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$), acá tenemos 2 Carbonos... inmediatamente escribimos 2 Carbonos en el CO_2 del lado derecho. $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$. Luego vemos los Hidrógenos... Tenemos 6 al lado izquierdo y sólo 2 al lado derecho, entonces amplificamos por 3... $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{CO}_2 + 3\text{H}_2\text{O}$. Tenemos 7 Oxígenos al lado derecho y sólo 3 al lado izquierdo... Amplificamos por 2... $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + 3\text{O}_2 \rightarrow 2\text{CO}_2 + 3\text{H}_2\text{O}$. Luego queda balanceada...

Para la reacción $(\text{NH}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7 \rightarrow \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O} + \text{Cr}_2\text{O}_3$, parten con Nitrógeno (listo), luego con Hidrógeno (8 a la izq. entonces amplifico agua por 4). Luego cuento los Oxígenos (7 a la izq. y 7 a la der.) y los Cromos (2 y 2). $(\text{NH}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7 \rightarrow \text{N}_2 + 4\text{H}_2\text{O} + \text{Cr}_2\text{O}_3$.

El hidróxido de Litio es usado en vehículos espaciales para remover el Dióxido de Carbono de la respiración, para formar Carbonato de Litio sólido y agua líquida. ¿Cuánta masa de CO_2 puede absorberse por 1 kg. de LiOH ? $\text{PA}(\text{Li})=6.941$, $\text{PA}(\text{O})=16$, $\text{PA}(\text{H})=1.008$. $\text{PA}(\text{C})=12$



Balanceando...



Calculando Pesos Moleculares:

$$\text{PM}(\text{LiOH}) = 23.95 \text{ gr / mol}$$

$$\text{PM}(\text{CO}_2) = 44 \text{ gr / mol}$$

En la reacción: 2 moles de LiOH + 1 mol de CO₂ producen 1 mol de agua y 1 mol de carbonato de Litio... Es decir por 2 moles de LiOH, necesitamos 1 mol de CO₂ siempre.

$$\text{En 1kg de LiOH hay } \frac{m}{\text{PM}(\text{LiOH})} = \frac{1[\text{kg}]}{23.95 \left[\frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \right]} = 0.04[\text{kmol}] = 41.75[\text{mol}]:$$

Ahora hacemos una pequeña proporción... (regla de tres).

$$\frac{2}{1} = \frac{23.95}{x} \rightarrow x = 20.9$$

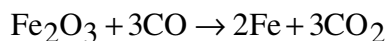
Corresponde a la cantidad de moles de CO₂, por cada 2 moles de LiOH hay 1 de CO₂.

Con esto calculamos el peso absorbido de Dióxido de Carbono.

$$m = 44 \left[\frac{\text{gr}}{\text{mol}} \right] \cdot 20.9[\text{mol}] = 919.60[\text{gr}]$$

Es decir cada kilo de LiOH absorben 919[gr] de anhídrido carbónico.

En un alto horno pirometalúrgico, la hematita (Fe₂O₃) se convierte en Hierro puro fundido. Se obtienen 1640kg de Hierro puro a partir de 2620kg de una muestra de Hematita. Calcular la pureza de la Hematita. PA(Fe)=55.85, PA(O)=16



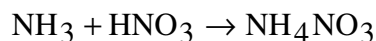
$$\text{PA}(\text{Fe}) = 55.85 \text{ kg/kmol}$$

$$\text{PM}(\text{Hematita}) = 159.7 \text{ kg/kmol}$$

La reacción es 1:2, es decir un mol de hematita produce 2 moles de Fe.

$$\begin{aligned} \text{moles(Fe)} &= \frac{1.64 \cdot 10^3 [\text{kg}]}{55.85 \left[\frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \right]} = 29.36 [\text{kmol}] \\ \frac{2 [\text{kmol}]_{\text{Fe}}}{1 [\text{kmol}]_{\text{Fe}}} &= \frac{29.39 [\text{kmol}]}{x} \rightarrow x = 14.68 [\text{kmol}] \\ m(\text{Fe}_2\text{O}_3) &= 159.7 \left[\frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \right] \cdot 14.68 [\text{kmol}] = 2344.4 [\text{kg}] \\ \% \text{pureza} &= \frac{2344.4}{2620} \cdot 100\% = 89.48\% \end{aligned}$$

En un proceso, 500 [kg] de Amoníaco reaccionan con 560 [kg] de ácido Nítrico para dar 698 [kg] de Nitrato de Amonio. Calcule el rendimiento de la Operación. PM(NH₃)=17.03, PM(HNO₃)=63.02, PM(NH₄NO₃)=80.05.



Es una reacción 1:1, es decir por 1 mol de amoníaco y 1 mol de ácido nítrico se forma 1 mol de nitrato de amonio.

Tengo:

$$500 [\text{kg}] / 17.03 [\text{kg/kmol}] = 29359.95 [\text{mol}] \text{ NH}_3$$

$$560 [\text{kg}] / 63.02 [\text{kg/kmol}] = 8886.07 [\text{mol}] \text{ HNO}_3$$

Si por cada mol de amoníaco necesito 1 mol de ácido... Entonces llegará un momento en que el amoníaco se "comerá" todos los moles de HNO₃, sobrando 29359.95-8886.07=20473.88 moles de amoníaco... Por limitar la reacción, al ácido nítrico se le conoce como *reactivo limitante*. Entonces si la relación es 1:1, se formarán 8886.07 moles de nitrato de amonio por 8886.07 moles de amoníaco y 8886.07 moles de ácido nítrico.

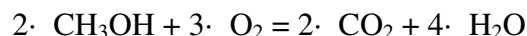
Al final se formarán 8886.07[mol] · 80.05[g/mol] = 711329.90 [gr] = 711.33 [kg] de nitrato de amonio. La eficiencia del proceso será el cuociente entre lo que sale en realidad y entre el valor teórico (calculado).

$$\eta_{\text{proceso}} = \frac{698}{711.33} = 0.98 \rightarrow 98\%$$

Escriba la ecuación de combustión del Metanol (CH₃OH) en aire y calcule los moles de aire requeridos para quemar 100 gr de metanol, calcule la proporción aire/metanol. Realice un balance másico de productos y reactantes. P(C)=12, P(O)=16, P(H)=1, P(N)=14

La reacción de combustión siempre ocurre en presencia de oxígeno, independiente si ocurre en el aire o no. Recuerden que el aire está formado por aproximadamente 21% de O₂ y 79% de N₂. Por lo tanto si se tiene un mol de aire, se tienen 0.21 moles de O₂ y 0.79 moles de N₂.

La reacción es la siguiente (deben balancearla)



Luego observan que para 2 moles de metanol necesitan 3 moles de O₂.

El peso molecular del metanol es = 12+3x1+16+1=32 [g/mol]

En 100 gr de metanol entonces hay 100 [g] / 32 [g/mol] = 3.13 moles. Realizamos la regla de tres con la proporción estequiométrica.

$\frac{2}{3.13} = \frac{3}{x}$, lo que equivale a decir “si para 2 moles de CH₃OH necesito 3 moles de O₂,

entonces para 3.13 ...”. Resolviendo, se obtiene que se necesitan 4.70 moles de O₂. Por lo

tanto se necesitarían $\frac{4.70}{0.21} = 22.38$ moles de aire.

La proporción se calcula con pesos atómicos/moleculares de las especies que participan (reactivos).

$$\text{PM}(\text{CH}_3\text{OH}) = 32$$

$$PM(O_2) = 32$$

$$\% CH_3OH = \frac{2 \times 32}{2 \times 32 + 3 \times 32} = \frac{2}{5} = 40\%$$

$$\% O_2 = 60\%$$

Por lo tanto la relación O_2/CH_3OH es de $60/40 = 1.5$ (también se puede demostrar por la proporción estequiométrica, pero se las resolví así para que vean que llegan a lo mismo).

El objeto de realizar el balance másico es para demostrar que la materia no se crea ni se destruye, sólo se transforma... Así que si realizáramos cualquier reacción en un compartimiento cerrado, el peso al inicio y al final de la experiencia serían los mismos.

Entonces, pasando de moles a gramos...

$$PM(CO_2) = 12 + 32 = 44 \text{ [g/mol]}$$

$$PM(H_2O) = 2 + 16 = 18 \text{ [g/mol]}$$

- En 22.38 moles de aire tengo $0.79 \times 22.38 = 17.68$ moles de N_2 (494.2 [g])
- En 4.70 moles de O_2 tengo $4.70 \text{ [g]} \times 32 \text{ [g/mol]} = 150.4 \text{ [g]}$
- Si con 2 moles de metanol formo 2 moles de CO_2 entonces con 3.13 moles de CH_3OH formaría también 3.13 moles de CO_2 (137.72 [g])
- Si con 2 moles de CH_3OH formo 4 moles de H_2O , entonces con 3.13 de CH_3OH formaría 6.23 moles de H_2O (112.14)

	Inicio (reactivos)	Fin (productos)
CH_3OH	100	-
O_2	150.4	-
CO_2	-	137.72
H_2O	-	112.14
N_2	494.2	494.2
TOTAL	744.6 [g]	744.06 [g]

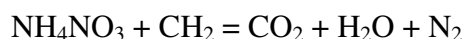
Noten que dan números ligeramente distintos por las aproximaciones realizadas. Ahora ¿Porqué se considera el Nitrógeno?. Se considera porque la reacción se realiza en aire, ahora el N_2 no participa en la reacción por lo que se denomina un *reactivo espectador*.

Obviamente igual debe de considerarse en el balance, puesto que ocupa espacio y no sería lo mismo dimensionar un reactor para un proceso con aire o sólo con oxígeno...

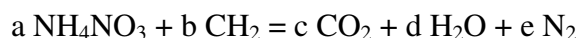
El ANFO es un explosivo de la clase de los nitrocarbonitratos. Los nitrocarbonitratos son mezclas de compuestos químicos que aportan oxígeno (oxidantes) y otros que aportan reductores, no pudiendo ninguno de ellos por separado considerarse como un explosivo propiamente tal. El ANFO está compuesto por nitrato de amonio (AN: Ammonium Nitrate NH_4NO_3) y por petróleo (FO: Fuel Oil CH_2). Calcule la proporción y los kg necesarios de cada ingrediente para obtener 2 kg de ANFO.

$\text{PM}(\text{NH}_4\text{NO}_3) = 80 \text{ g/mol}$, $\text{PM}(\text{CH}_2) = 14 \text{ g/mol}$

La reacción necesaria, para no liberar gases tóxicos es la siguiente:



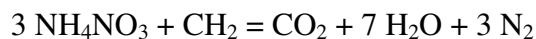
Una forma de balancear ecuaciones es escribiendo un sistema, de modo que se conserve la cantidad de moles en los reactantes y en los productos, se éste modo calculamos los valores de a, b, c, d y e en la ecuación:



H	$4a + 2b = 2d$	$4^a + 2 = 2d$
N	$2a = 2e$	$2a = 2e$
O	$3a = 2c + d$	$3a = 2c + d$
C	$b = c$	$1 = c$

Se obtiene un sistema de 5 incógnitas para 4 ecuaciones, suponiendo arbitrariamente una variable como 1 ($b = 1$ por ejemplo), se obtienen los valores de a, c, d y e.

$a = 3$, $b = 1$, $c = 1$, $d = 7$, $e = 3$.



Hay 2 formas de calcular las proporciones. Como se vio en clases o como sigue:

Si me doy una base de cálculo de 1000 gr de NH_4NO_3 , calculo la cantidad de moles que hay en 1000 gr (12.5 moles). Por proporción estequiométrica, por 3 moles de NH_4NO_3 , necesito 1 mol de CH_2 . Por lo tanto.

$$\frac{3}{12.5} = \frac{1}{x} \rightarrow x = 4.17 \text{ moles de CH}_2 \text{ (que equivalen a 58.33 g de CH}_2\text{)}.$$

De esta forma tengo 1000 g de NH_4NO_3 y 58.33 g de CH_2 . El porcentaje de AN que tengo que mezclar con FO para que reaccione como quiero se calcula:

$$\% \text{ AN} = \frac{1000}{1000 + 58.33} 100\% = 94.48\% , \text{ por lo tanto el porcentaje de FO es}$$

$$\% \text{ FO} = 100\% - 94.48\% = 5.52\%$$

Para 2 kg de ANFO entonces necesitamos: 1889.6 g de AN y 110.4 g de FO.