

EL CONCEPTO DE MOL.

Antes de nada vamos a recordar la definición de la unidad de masa atómica, conocida como u.m.a. o simplemente u. y la historia de su medición:

- En **1801 Dalton** eligió como patrón de referencia el H, por ser el elemento más ligero, y le dio el valor de 1. A partir de él se estableció la escala de masas atómicas relativas al H tomado como 1. Por ejemplo, para el compuesto cloruro de hidrógeno, se conoce experimentalmente que la relación entre las masas de los elementos cloro e hidrógeno que se combinan para formar el compuesto tiene un valor de 35,453 luego la relación entre las masas o pesos de sus átomos respectivos estará en la misma relación:

Masa de Cl/masa de H = 35,453 = masa atómica de Cl/masa atómica de H. Si tomamos la masa atómica del H como 1 tendremos que la masa atómica del Cl es 35,453 veces mayor que el del H.

- En **1903** una Comisión Internacional tomó como patrón el O, ya que éste se combina con todos los elementos y forma compuestos más estables y para no alterar los valores de la tabla se le dio al patrón O el valor 16.
- En **1961** se acordó tomar como patrón un isótopo y se eligió el más abundante del carbono que es el llamado carbono-12, lo que supuso un cambio del 0,004% respecto de la tabla anterior. *El carbono-12* (^{12}C o C-12) se tomó como patrón o isótopo de referencia y se le asignó el valor exacto de 12 veces la unidad de masa atómica. Por tanto, la unidad de masa atómica es un doceavo de la masa de un átomo de carbono-12.

Definición de unidad de masa atómica (u): “La unidad de masa atómica es la doceava 1/12 parte de la masa de un átomo de Carbono-12”

A partir de esa definición anterior llegaremos al concepto de mol, una de las siete magnitudes fundamentales del S.I., y la unidad química por excelencia. El concepto de mol se usa para contar grandes cantidades de unidades muy pequeñas (“unidades elementales” diremos en la definición). Va a ser un número fijo de partículas, sean estas átomos, moléculas, electrones, protones, etc. Ese número fijo será el nº de átomos que haya en una determinada cantidad de carbono-12, concretamente en 12 g (para que sea el mismo nº. Así, 1 átomo de C-12=12 u.m.a. y 1 mol de C-12=12 g).

Así, la definición de mol queda:

Definición de mol en el SI: “Un mol es la cantidad de sustancia que contiene tantas entidades elementales, es decir, átomos, moléculas, iones, etc., como átomos hay en 0,012 kg del isótopo de Carbono-12”.

El nº de partículas que contiene un mol se denomina número de Avogadro: *Es el número de entidades elementales que contiene 1 mol.* Las determinaciones más recientes le dan el valor de $N_A=6,02205 \times 10^{23}$. El número es adimensional (en algunos textos se le dan las unidades partículas/mol o mol^{-1}).

También podemos definir mol, por tanto, como la cantidad de sustancia que contiene el nº de Avogadro de entidades elementales. Ejemplos: 1 mol de H_2O serán $6,022 \cdot 10^{23}$ moléculas de H_2O y un mol de electrones será $6,022 \cdot 10^{23}$ electrones.

El concepto de mol se utiliza en química con dos significados:

- Como hemos visto, es un número tremendamente grande de las unidades que queramos contar. Concretamente, es $6,022 \cdot 10^{23}$ (Número de Avogadro, N_A) de las unidades consideradas. Desde este punto de vista, el mol es un múltiplo en el mismo sentido que lo es la docena o la centena, pero mucho más grande y adecuado para trabajar con átomos o moléculas, que son muy pequeños. En general debemos aclarar cuando hablemos de mol a qué partículas nos referimos. Si decimos un mol de agua, entenderemos que las partículas son “moléculas de agua” y si decimos un mol de hierro,

como éste está en estado atómico, entenderemos que las partículas son “átomos de Fe”. Si no está claro, como en el oxígeno (hay moléculas y átomos de oxígeno) debemos aclarar a qué nos referimos.

- Pero además el concepto de mol en química tiene mucha importancia porque además de garantizarnos un nº exacto de partículas también nos produce una masa exacta y conocida. No sabemos cuánto pesaría un mol de nueces, ya que cada nuez pesa una cantidad. Además, un mol de nueces no pesaría lo mismo que otro mol de nueces de un señor de California, que empleara otras nueces distintas. Sólo sería útil en el sentido de que habría el mismo nº de nueces. Sin embargo, un mol de un compuesto (un mol de moléculas, evidentemente) tiene una masa en gramos fija ya que todas las moléculas tienen idéntica masa.

La masa de una molécula es la denominada masa molecular, se simboliza por M, y se calcula sumando las masas atómicas de los elementos que la constituyen, multiplicados por los subíndices que indican el nº de átomos en cada molécula de sustancia. Así, la masa molecular del agua es: $M(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot M(\text{H}) + 1 \cdot M(\text{O}) = 2 \cdot 1 \text{ u.m.a.} + 1 \cdot 16 \text{ u.m.a.} = 18 \text{ u.m.a.}$

¿Cuál será la masa de 1 mol de agua, de 1 mol de moléculas de agua, en gramos? Para poder hacer el cálculo necesitamos conocer el factor de equivalencia entre u.m.a. y g. Si recordamos la definición de u.m.a.

$$1 \text{ u.m.a.} = \frac{1}{12} m({}^{12}_6\text{C}) = \frac{1}{12} \frac{12 \text{ g de carbono}}{N_A \text{ átomos}} = \frac{1}{N_A} \text{ gramos} = 1,66 \cdot 10^{-24} \text{ gramos}$$

$$\approx 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

Quizás es más fácil para recordar la relación u.m.a.-g, que podemos hallar pensando en que en 12 g de C-12 hay el N_A de átomos con masa 12 u.m.a. cada uno exactamente.

$$12 \text{ g } {}^{12}\text{C} = N_A \text{ átomos C} \cdot \frac{12 \text{ u}}{1 \text{ átomo C}}; 1 \text{ g} = N_A \text{ u.m.a.} = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ u.m.a.}$$

Por tanto, la masa de un mol de agua será:

$$1 \text{ mol H}_2\text{O} = N_A \text{ moléculas H}_2\text{O} \cdot \frac{18 \text{ u.m.a.}}{1 \text{ molécula H}_2\text{O}} \cdot \frac{1 \text{ g}}{N_A \text{ u.m.a.}} = 18 \text{ g}$$

Ocurre lo mismo que con el C-12. Un mol de átomos que tienen una masa de 12 u.m.a. tiene de masa 12 g y un mol de moléculas de agua, de masa molecular 18 u.m.a., tiene una masa de 18 g. y vemos que pasará siempre lo mismo al hacer el cálculo anterior.

La masa de un mol de sustancia se llama masa molar, se representa como M_m y sus unidades son g/mol y acabamos de demostrar que “la masa molar de una sustancia es la masa en gramos de la misma que es numéricamente igual a la masa molecular en u.m.a.”. CUIDADO: Podemos tener la tentación de acortar la definición y decir que la masa molar es la masa molecular en gramos, pero eso sería un grave error. La masa de una molécula de agua en gramos no es 18 g, evidentemente. Se puede calcular con facilidad, sabiendo ahora que un mol de agua tiene una masa de 18 g y contiene N_A moléculas

$$\text{masa de una molécula de H}_2\text{O en g} = \frac{18 \text{ g en 1 mol}}{N_A \text{ moléculas en 1 mol}} = 5,12 \cdot 10^{-27} \text{ g}$$

Una cantidad de masa realmente pequeña.

Así, la masa de una molécula de H_2O es 18 u.m.a. y la de un mol, la masa molar, es 18 g/mol, y contiene $6,022 \cdot 10^{23}$ moléculas de agua

De la misma manera, un mol de átomos de oxígeno ($6,022 \cdot 10^{23}$ átomos de oxígeno) pesarán 16 gramos; mientras que un mol de moléculas de oxígeno (O_2) pesarán 32 gramos, y contendrán $6,022 \cdot 10^{23}$ moléculas de oxígeno (es decir, $2 \times 6,022 \cdot 10^{23}$ átomos de oxígeno).

Un mol de agua son 18 gramos, mientras que un mol de ácido sulfúrico son 98 gramos, y un mol de cloruro sódico 65,3 gramos (compruébalo con ayuda de la tabla periódica). Por tanto, el mol representa una masa distinta para cada sustancia pero corresponde con el mismo número de partículas

Piensa en una docena de huevos y una docena de melones; ambos son el mismo número pero no pesan lo mismo ¿no?

Composición centesimal

Usando el concepto de mol se puede hallar el porcentaje en masa que forma cada compuesto. Por ejemplo, el ácido nítrico tiene una masa molar de 63 g/mol y en un mol hay

$$\text{En } 63 \text{ g de } \text{HNO}_3 \left\{ \begin{array}{l} 1 \text{ mol de H} = 1 \text{ g}; \% \text{ H} = \frac{1}{63} \cdot 100 = \mathbf{1,59\% \text{ de H}} \\ 1 \text{ mol de N} = 14 \text{ g}; \% \text{ N} = \frac{14}{63} \cdot 100 = \mathbf{22,22\% \text{ de N}} \\ 3 \text{ moles de O} = 3 \cdot 16 = 48 \text{ g de O}; \% \text{ O} = \frac{48}{63} \cdot 100 = \mathbf{76,19\% \text{ de O}} \end{array} \right.$$

DISOLUCIONES

Las mezclas homogéneas líquidas las denominamos **disoluciones**, donde distinguimos entre **disolvente** (o componente que está en mayor proporción) y **soluto** (componente minoritario). Las disoluciones las diferenciamos según la proporción soluto/disolvente en:

- disoluciones **diluidas**, cuando hay poco soluto para una cierta cantidad de disolvente
- **concentradas**, cuando la cantidad de soluto es grande en proporción al disolvente
- **saturadas**, si el disolvente ya no admite más soluto.

Formas de expresar la concentración de las disoluciones.

Cuando trabajemos con disoluciones es imprescindible conocer o expresar la concentración de la misma.

Entendemos por **concentración** de una disolución la **relación que hay entre la cantidad de soluto y la cantidad de disolvente o de disolución**.

La concentración la podemos expresar de las siguientes formas:

Concentración en g/L

Nos da los gramos de soluto disueltos en cada litro de disolución.

$$C \left(\frac{\text{g}}{\text{L}} \right) = \frac{\text{masa de soluto (g)}}{\text{volumen de disolución (L)}}$$

Tanto por ciento en masa

Nos da los gramos de soluto disueltos en cada 100 gramos de disolución.

$$C(\% \text{ en masa}) = \frac{\text{masa de soluto (g)}}{\text{masa de disolución (g)}} \cdot 100$$

Molaridad o concentración molar

Es la forma más frecuente de expresar la concentración de las disoluciones. La molaridad es la relación entre el número de moles de soluto y los litros de disolución. Se representa por M y sus unidades son mol/L.

$$M \left(\frac{\text{mol}}{\text{L}} \right) = \frac{\text{numero de moles de soluto}}{\text{Volumen de disolución (L)}}$$

LEY DE LOS GASES

Todos los gases, independientemente de su naturaleza química o del tamaño de sus moléculas, responden a unas leyes muy sencillas, que estudiaremos a continuación. Antes de nada debemos recordar que el volumen de un gas depende de tres factores: de la masa del gas, concretamente del nº de partículas que contiene (del nº de moles), de la temperatura (al aumentarla los gases se dilatan) y de la presión (cuanto mayor sea la presión ejercida sobre el gas menos volumen tendrá). Esa relación entre las cuatro variables la podemos resumir como:

$$V \text{ depende de } \left\{ \begin{array}{l} n \text{ (número de moles)} \\ p \text{ (presión)} \\ T \text{ (Temperatura)} \end{array} \right.$$

Recordamos:

- La presión, p , como veremos más adelante en física, se define como $p=F/S$ (Fuerza/Superficie). Su unidad en el S.I. es el Pascal, Pa ($1 \text{ Pa}=1 \text{ N/m}^2$). También se usan la atmósfera, atm (la presión que realiza la atmosfera a nivel del mar en condiciones habituales), definida como la presión equivalente de una columna de mercurio de 760 mm de altura. La relación entre ellas es:
 $1 \text{ atm}=760 \text{ mm Hg}=101300 \text{ Pa}=1013 \text{ hPa (hectoPascales)}=1013 \text{ mbar}$ (al hPa se le denominaba antiguamente milibar, por ser la 1/1000 parte de un bar= 10^5 Pa)
- El volumen se mide en m^3 , cm^3 o L, que es 1 dm^3 . No confundir con la masa (la relación m/V la da la densidad, muy variable en el caso de los gases)
 $1 \text{ m}^3=1000 \text{ dm}^3=1000 \text{ L}=10^6 \text{ cm}^3$
- La Temperatura absoluta T se mide en K (no grados), la escala establecida por Lord kelvin que pone en 0 en la temperatura más baja alcanzable, los -273°C . La relación con los grados centígrados o Celsius ($^\circ\text{C}$) es **$T(\text{K})=t(^\circ\text{C})+273$**

Para hallar la relación entre el V y cada una de las 3 variables de las que depende mantendremos 2 fijas y veremos la variación del V al cambiar la tercera de las variables independientes (n , p , T)

Ley de Avogadro (V con n ; p y $T=\text{ctes}$).

Para explicar una de las leyes volumétricas en la reacción de los gases, Avogadro tuvo que suponer que en **volúmenes iguales de gases diferentes hay el mismo número de moléculas cuando la temperatura y la presión son constantes**. Por lo tanto el número de moléculas, y el número de moles, es proporcional al volumen, V , del gas, independientemente de su composición. 1 mol de CH_4 y 1 mol de CO_2 ocupan lo mismo en las mismas condiciones de p y T , aunque tengan distinta masa.

$$V = kn \quad (p, T \text{ ctes})$$

Ley de Boyle-Mariotte (V con p ; n y $T=\text{ctes}$)

A temperatura constante, los volúmenes que ocupa una misma masa de gas son inversamente proporcionales a las presiones que soporta:

$$pV = k' \quad (T, n \text{ ctes})$$

Ley de Charles y Gay-Lussac (V con T ; n y $p=\text{ctes}$)

Expresando la temperatura en grados Kelvin, la ley de Charles y Gay-Lussac queda en una forma muy sencilla: **a presión constante, el volumen de una misma masa de gas es directamente proporcional a la temperatura absoluta:**

$$V = k'' T \quad (p, n \text{ ctes})$$

Ecuación de estado de los gases.

Podemos despejar el V en las tres leyes anteriores y unirlos en una sola:

$$\left. \begin{array}{l} V = k \cdot n \\ V = k' \frac{1}{p} \\ V = k'' T \end{array} \right\} V = R \frac{nT}{p}$$

O también:

$$pV=nRT$$

Donde R es la constante de proporcionalidad que engloba las anteriores k , k' , k'' .

Esta ecuación es la denominada **ecuación de estado del gas ideal**, válida para el estudio de los gases a presiones bajas. Si las presiones son elevadas las interacciones entre las moléculas y el propio tamaño de las mismas hace preciso introducir parámetros correctores en esta ecuación. Se llama del "gas ideal" porque puede ser deducida de modo teórico suponiendo que un gas está formado por partículas que se mueven en línea

recta, sin interaccionar entre ellas, con una energía cinética media proporcional a la T y que la presión del gas es el nº de choque/s de las partículas con las paredes. Al hacer los cálculos se obtiene $pV=nRT$.

El valor de R se halla sabiendo que un mol de gas ocupa 22,4 L a 1 atmósfera y 273 K (**denominadas condiciones normales, c.n.**):

$$R = \frac{pV}{nT} = \frac{1 \text{ atm} \cdot 22,4 \text{ L}}{1 \text{ mol} \cdot 273,15 \text{ K}} = 0,082 \frac{\text{atm} \cdot \text{L}}{\text{K} \cdot \text{mol}}$$

En resumen, $R = 0,082 \frac{\text{atm} \cdot \text{L}}{\text{K} \cdot \text{mol}}$ y para **usarla con ese valor p debe estar en atm, el V en Litros y la T en K.**

CÁLCULOS ESTEQUIOMÉTRICOS:

Las ecuaciones químicas suministran la información necesaria para calcular las cantidades de sustancias consumidas o producidas en las reacciones químicas.

Para efectuar los cálculos sobre una reacción, además de tener la correspondiente reacción ajustada, hace falta conocer por lo menos la cantidad de una de las sustancias que intervienen en la reacción, pudiéndose calcular las cantidades de las demás sustancias.

El mejor método de ajuste *es por tanteo*, probando valores hasta que se consigue el mismo nº de átomos de todos los elementos en los reactivos y los productos. Algunas reglas interesantes a seguir son:

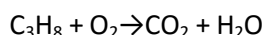
- Si un elemento aparece solamente en un compuesto en cada lado, *ajustarlo en primer lugar*.
- Si uno de los reactivos o productos está como elemento libre, *ajustarlo al final*.
- Si un grupo de átomos permanece agrupado en la reacción (NO_3^- , SO_4^{2-}), ajustarlos como una unidad.
- A veces se pueden usar coeficientes fraccionarios y luego multiplicar por un nº para quitar denominadores

Cálculos con masas.

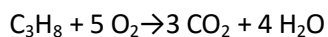
Una vez que tenemos la ecuación química ajustada podemos establecer proporciones entre los reactivos y productos a través del concepto de mol. En estos problemas tendremos un dato y una incógnita que calcular. Se supone que de los demás reactivos tenemos exceso para que la reacción pueda ser completa.

Ejemplo: Calcula los gramos de propano que tenemos que quemar en presencia de oxígeno para obtener 500 g de dióxido de carbono.

1º) Escribimos la ecuación química de la reacción:



2º) Ajustamos la ecuación:



3º) la reacción ajustada anterior tiene varias lecturas. Se puede leer a nivel atómico-molecular (1 molécula de propano se combina con 5 moléculas de oxígeno, para dar 3 de CO_2 y 4 de agua), o bien, multiplicando por el número de Avogadro, N_A , lo convertimos en moles, cantidad macroscópica medible en un laboratorio y que nos permitirá realizar nuestros cálculos.

C_3H_8	+	5 O_2	\rightarrow	3 CO_2	+	4 H_2O
1 molécula propano	+	5 moléculas O_2	\rightarrow	3 moléculas CO_2	+	4 moléculas H_2O
N_A moléculas propano	+	$5 \cdot N_A$ moléculas O_2	\rightarrow	$3 \cdot N_A$ moléculas CO_2	+	$4 \cdot N_A$ moléculas H_2O
1 mol propano	+	5 moles O_2	\rightarrow	3 moles CO_2	+	4 moles H_2O
44 g de propano	+	5·32 g O_2	\rightarrow	3·44 g CO_2	+	4·18 g de H_2O
44 g de propano	+	160 g O_2	\rightarrow	132 g CO_2	+	72 g de H_2O
		204 g de reactivos	\rightarrow			204 g de productos

4º) Partiendo del dato conocido y de las relaciones en moles de las sustancias llegamos a la incógnita mediante factores de conversión:

$$500 \text{ g } CO_2 \cdot \frac{1 \text{ mol } CO_2}{44 \text{ g } CO_2} \cdot \frac{1 \text{ mol } C_3H_8}{3 \text{ mol } CO_2} \cdot \frac{44 \text{ g } C_3H_8}{1 \text{ mol } C_3H_8} = 166,7 \text{ g } C_3H_8$$

Aunque pueda parecer latoso, es muy conveniente escribir al lado de cada cantidad numérica su correspondiente unidad (mol, gramo) y a la sustancia a la que se refiere. Así vemos que al final de la primera división obtenemos “moles de CO_2 ”, al final de la segunda “moles de C_3H_8 ” y al final del todo “g de C_3H_8 ”.