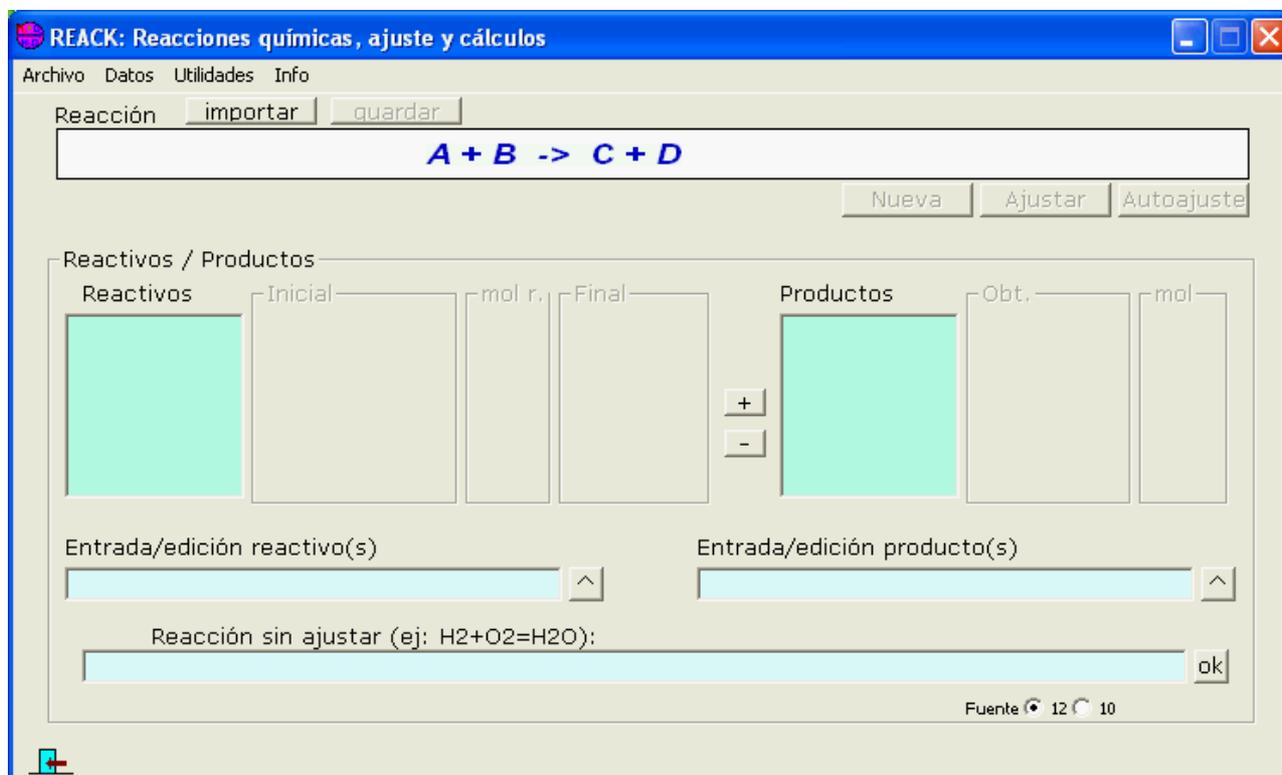


REACK

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.

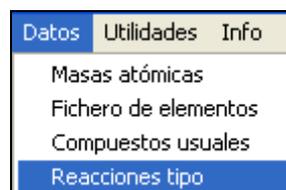
Sólo se tratará con reacciones “moleculares” (no iónicas parciales) y que contengan exclusivamente las fórmulas implicadas (no indicaciones de estado u otras)

- 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. The dialog has a title bar 'Reacciones tipo' and standard window controls. It contains a 'Tipo' section with a dropdown menu set to 'aleatorio' and a text field containing 'Combustión'. Below this is a 'Reacciones' section with a search field 'Buscar:' and a text field containing the chemical formula 'C3H8+O2=CO2+H2O'. There is also a 'Descr.' section with a text field containing 'Combustión del propano'. At the bottom right is a 'Pasar ->' button. Annotations with arrows point to various elements: 'Grupo de reacciones' points to the 'Tipo' dropdown; 'Nuevo grupo' points to the '+' button; 'Elimina' points to the 'x' button; 'Acepta nuevo' points to the 'ok' button; 'Reacción seleccionada' points to the chemical formula text field; 'Nueva reacción' points to the search field; 'Elimina' points to the 'x' button; 'Acepta nueva' points to the 'ok' button; 'Descripción (opcional)' points to the 'Descr.' text field; and 'Transfiere la reacción al programa' points to the '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.

Reacción

$C_3H_8 + O_2 \longrightarrow CO_2 + H_2O$

Combustión del propano

Reactivos / Productos

Reactivos	Inicial	mol r.	Final	Productos	Obt.	mol
C3H8 O2				CO2 H2O		

Entrada/edición reactivo(s)

Entrada/edición producto(s)

Reacción sin ajustar (ej: H2+O2=H2O):

Fuente 12 10

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

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

fórmula nombre

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

C₃H₈ + O₂ → CO₂ + H₂O

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:

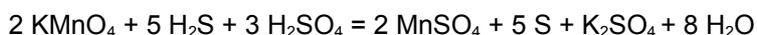
Reacción

C₃H₈ + 5 O₂ → 3 CO₂ + 4 H₂O

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.

The screenshot shows the REACK software interface. At the top, the title bar reads "REACK: Reacciones químicas, ajuste y cálculos". Below it, a menu bar contains "Archivo", "Datos", "Utilidades", and "Info". The main window displays the chemical reaction $C_3H_8 + 5 O_2 \rightarrow 3 CO_2 + 4 H_2O$ and its name, "Combustión del propano". There are buttons for "importar", "guardar", "Nueva", "Cálculos", and "Autoajuste".

The "Cálculos sobre la reacción" section is divided into "Reactivos" and "Productos". Under "Reactivos", there are input fields for "Inicial" and "mol r.". For C_3H_8 , the initial amount is 100 g. For O_2 , the initial amount is 200 L cn. The "Productos" section has "Obt." and "mol" columns, which are currently empty. Below this, there is a field for "M.A.: C = 12.01, H = 1.008, O = 16.00" and buttons for "Rst", "Calc", and "Problema >".

At the bottom, there is a section for "Unidades O2" with radio buttons for "gramo", "mol", "V disolución", and "L cn". The "L cn" option is selected. There are also fields for "pureza" (100 %), "M=" (1 mol/L), "P:" (1.00 atm), and "T:" (20.0 °C).

Annotations: An orange box labeled "Entrar dato(s)" points to the input fields for the reactants. Another orange box labeled "Elección unidades" points to the "Unidades O2" section.

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

This screenshot shows the same REACK software interface after the calculation has been performed. The chemical reaction and name remain the same. The "Cálculos sobre la reacción" section now displays the results. Under "Reactivos", the "Final" column is populated: 21.3g for C_3H_8 and 0.000L cn for O_2 . Under "Productos", the "Obt." column is populated: 236 g for CO_2 and 129 g for H_2O . The "mol" column shows 5.36 for CO_2 and 7.14 for H_2O . The "M.A." field and buttons "Rst", "Calc", and "Problema >" are also visible.

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 = 1.79x	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

Buscar: **ok** aleatoria

C₆H₅CH₃+O₂=CO₂+H₂O

Ordenar

- opcional: introducir Descripción
- Aceptar con **ok**

Descr. Combustión del 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

ok

Concentración

Molaridad 2.74

molalidad 2.86

g/l 100

% en masa 10.4

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>