Fundamentos de Química
Curso 2007/08

Páginas web:
área Q-F: http://www.upo.es/depa/webdex/quimfis/aquifis.html
asignatura: únicamente WebCT

Patrick Merkling: tutorías Martes y Miércoles de 12:30-14:00
Jueves: 17:00-20:00
Edif 24B, 3ª planta, desp. 11
Sofía Calero Díaz: tutorías por determinar
Edif 24B, 3a planta, desp. 17

Libros de la asignatura y bibliografía complementaria:

Atkins, Jones: "Principios de Química –Los caminos del descubrimiento", 3ª ed., 2006
Petrucci y Hardwood. "Química General", 8ª Edición, Prentice Hall. 2003
K.W. Whitten y col., "Química General", 5ª Edición, McGraw-Hill, 1998
R. Chang, "Química", 6ª Edición, McGraw-Hill, 1999
Silberberg, "Química", McGraw-Hill, 2002
M. Paraira, "Introducción a la formulación y nomenclatura química inorgánica-orgánica"

Normas de la asignatura

Estarán disponibles a través del sitio internet de la asignatura
Aclaran la obtención de las calificaciones:
Para aprobar: nota mínima anual de 5, tanto en teoría como en prácticas.

Un examen de prácticas a final de curso (con libreta y guiones). Un suspenso en el examen de prácticas significa repetir la asignatura completa.

Nota final: 80% examen de teoría, 20% prácticas

Examen de teoría: 60% preguntas de teoría, 40% problemas

Programa de prácticas

1. Identificación y manejo de material de laboratorio, preparación de disoluciones y medida de densidades
2. Tabla periódica y obtención de información química en internet
3. Separación de fases
4. Espectrofotometría
5. Calorimetría
6. Destilación
7. Equilibrio ácido-base
8. Disolución reguladora de pH. Analítica de metales pesados
9. Cromatografía líquida de adsorción en columna (CC) y capa fina (TLC)
10. Síntesis del ácido acetil salicílico

Material necesario para las prácticas: bata y gafas.

Fecha prevista de la primera práctica: 8 de octubre (pendiente de confirmación)
Coordinadora de prácticas: Sofía Calero Díaz

Tema 1: Conceptos y herramientas básicas de la química

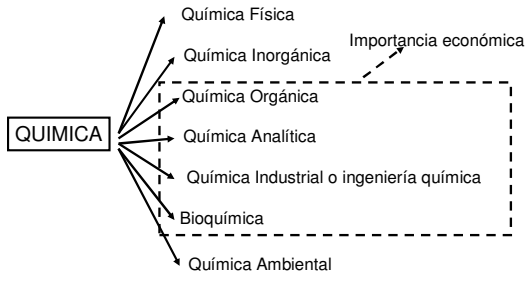
1.1 Concepto y aplicaciones de la química
1.2 Clasificación de la materia.
1.3 Dalton
1.4 Número de Avogadro
1.5 Masa atómica y molecular
1.6 Ecuaciones químicas y estequiometría

1.1 Concepto y aplicaciones de la química

Química: la ciencia que estudia la estructura, propiedades, y transformaciones de la materia

Estructura: átomos y moléculas, enlace químico, estructura electrónica y técnicas instrumentales como espectroscopia, la difracción de neutrones y rayos X, etc.
Propiedades: estados de agregación (puntos de fusión y ebullición, compresibilidad, dureza, etc...), disoluciones (propiedades coligativas, miscibilidad, solubilidad), reactividad
Transformaciones: reacciones químicas, cambios de fase

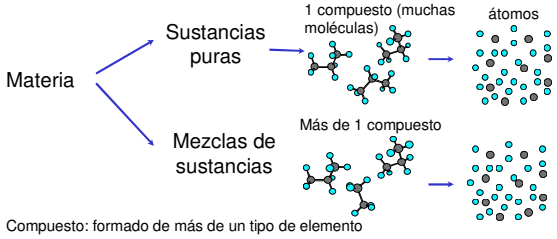
Subdivisión habitual de los sectores de la química



1.2 (Una) Clasificación de la materia.

Sustancia = forma de materia con una composición constante, incluso a escala microscópica. Posee una fórmula química **= compuesto o elemento**

Mezcla = combinaciones de dos o más sustancias en las que éstas conservan sus propiedades características



Compuesto: formado de más de un tipo de elemento

- Una sustancia puede descomponerse químicamente en sus elementos constituyentes
- Una mezcla puede separarse físicamente en sus componentes. Ejemplo: destilación, filtración, etc...)

➢ Un ejemplo de sustancia: el agua (H_2O)

Composición constante: 2 gramos de hidrógeno por 16 de oxígeno
Su descomposición es una reacción química

$$H_2O \rightarrow H_2 + ½\ O_2$$

➢ Un ejemplo de mezcla: el aire (O_2, N_2, CO_2 y otros componentes en proporciones variables)

Los componentes del aire se pueden separar, por ejemplo, con un tamiz molecular

Ley de Lavoisier de la conservación de la masa
y
Ley de Proust de las proporciones definidas

Antoine Lavoisier (1789):
"Tratado elemental de Química"

Joseph Proust (1797):
"... Así concluiré por deducir de estos experimentos el principio que he establecido al principio de esta memoria, esto es, que el hierro al igual que muchos otros metales está sujeto a la ley de la naturaleza que gobierna en toda combinación auténtica, esto es, aquella que la une en dos proporciones constantes con el oxígeno. A este respecto, esto no le diferencia del estaño, mercurio, plomo y, en una palabra, de cualquier combustible conocido"

1.3 Dalton

John Dalton: Teoría Atómica (1803-1808)
"El átomo es la unidad básica de un elemento que interviene en una combinación química"

1. Cada elemento químico se compone de partículas diminutas e indestructibles denominadas átomos. Los átomos no pueden crearse ni destruirse durante una transformación química.
2. Todos los átomos de un elemento son semejantes entre sí pero distintos a los del resto de los elementos.
3. Los átomos son indivisibles. Por tanto, en los compuestos, los diferentes elementos se combinan en una proporción numérica sencilla. Dicha combinación da lugar a la fórmula molecular de ese compuesto que representa la composición de la "molécula": A_xB_y

Ley de conservación de la masa
Ley de las proporciones definidas

1.4 Avogadro

Una de las propiedades de un átomo determinado es su masa.
Masa de n átomos: m= n x (masa atómica)

Masa: magnitud física fundamental asociada a la cantidad de materia

Concepto de mol

Definición: El número de Avogadro es el número de átomos de ^{12}C contenidos en 12 g de este elemento.

Número de Avogadro, $N_A = \frac{12\ g}{1.9926 \times 10^{-23}\ g} = 6.022 \times 10^{23}$

Masa de un átomo de Carbono 12

Definición: 1 mol es la cantidad de sustancia equivalente a un número de Avogadro de átomos o moléculas de esa sustancia"

Una de las propiedades más utilizadas en química de un mol de sustancia es su masa.

⇒ Existen dos formas de caracterizar la cantidad de materia en Química:

1. Unidades molares: número de moles de una sustancia pura
2. A través de su masa: Kg en el Sistema Internacional, g en el sistema CGS

El uso del mol como unidad de masa en Química surge directamente de la Teoría Atómica, la Ley de las proporciones definidas y la necesidad de poder estimar a partir de la masa absoluta de una muestra de sustancia la cantidad de átomos o moléculas que hay en dicha muestra

1.5 Masa atómica y molecular

Masa absoluta = Masa molar atómica/molecular x número de moles

Versión microscópica:
Masa absoluta = Masa de un átomo/molécula x número de átomos o moléculas

Masa atómica de un elemento = masa de un mol de átomos de dicho elemento = masa de un átomo x N_A

Masa molecular de un compuesto = masa de un mol de "moléculas" de dicho compuesto = masa de una "molécula" x N_A

1.6 Ecuaciones químicas y estequiometría

Estequiometría: se refiere a las relaciones fijas (Teoría Atómica) que existen entre las cantidades molares de los elementos en un compuesto y de los compuestos entre sí en una reacción química

Estequiometría en un compuesto

Fórmula molecular indica el número de átomos en una molécula de un compuesto. Siempre involucra números enteros

Fórmula empírica indica el número relativo de átomos o de moles de átomos en un compuesto. Puede incluir números fraccionarios.

Fórmula estructural muestra el orden en el que se unen los átomos en la molécula y el tipo de enlace

Ejemplo 1.1.: n-Butano

Fórmula empírica: C_2H_5
Fórmula molecular: C_4H_{10}
Fórmula estructural: CH_3-CH_2-CH_2-CH_3

Ejemplo 1.2.: La vitamina C, cuya masa molar es 176.14 g•mol^{-1}, está compuesta por C, H y O exclusivamente. Una muestra de 50 g de vitamina C contiene 20.45 g de C y 2.29 g de H. Calcular: a) su fórmula empírica y b) su fórmula molecular.

Ecuaciones químicas

Una ecuación química representa de una forma sencilla la estequiometría de una reacción:

$$a\,A + b\,B \rightarrow c\,C + d\,D$$

...significa que a moles de A reaccionan con b moles de "B" para dar c moles de "C" y d moles de "D"

La estequiometría de una reacción química es un reflejo de las relaciones y transformaciones moleculares que sufren los átomos involucrados en esa reacción

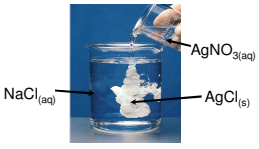
Ecuaciones químicas (II)

$$a\,A + b\,B \rightarrow c\,C + d\,D$$

- Se dice que los reactivos de una reacción química están en proporciones estequiométricas si sus cantidades iniciales corresponden a las relaciones molares contenidas en la correspondiente ecuación química
- Se dice que un reactivo está en exceso si su cantidad inicial excede la correspondiente a su proporción estequiométrica.
- Se dice que un reactivo es limitante si se encuentra en cantidad inferior a su proporción estequiométrica

Ejemplo 1.3.: El nitrato de plata y el cloruro sódico reaccionan en disolución acuosa conforme a la siguiente ecuación química

$$AgNO_{3(aq)} + NaCl_{(aq)} \rightarrow AgCl_{(s)} + NaNO_{3(aq)}$$

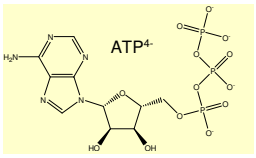
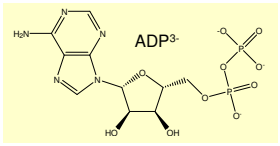


Se disuelven 10 gramos de nitrato de plata en 100 ml de disolución 0.1 molar de cloruro sódico. ¿Están los reactivos en proporción estequiométrica? Si no es así ¿cuál de ellos es el limitante? ¿Cuánto cloruro de plata precipitará?
Datos: M_{Ag}=107.9 g/mol
M_{Cl}=35.5 g/mol

Equilibrar las siguientes reacciones

Ejemplo 1.4: bacterias metanogénicas
Reactivos: H_2 y CO_2 Productos: CH_4 y H_2O

Ejemplo 1.5:

$ADP^{3-} + HPO_4^{2-} + glucosa \rightarrow ATP^{4-} + H_2O + lactato^-$

Glucosa: $C_6H_{12}O_6$
Lactato- : $C_3H_5O_3^-$