

3.1 ESTEQUIOMETRIA

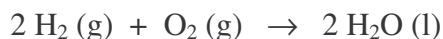
Estequiometria vol dir *estudi quantitatiu de les reaccions químiques*, o, expressat d'una altra forma, càlculs numèrics aplicats a les reaccions per tal de resoldre qüestions com ara la quantitat d'una substància que es combina amb una altra o el rendiment que s'obté en un determinat procés.

👁️ EXEMPLES DE PROBLEMES RESOLTS:
CÀLCULS ESTEQUIOMÈTRICS AMB MASSES.

Es fan reaccionar 10 g d'hidrogen gas amb la quantitat necessària d'oxigen molecular per tal de sintetitzar aigua. Calculeu estequiomètricament:

- a) *la quantitat d'oxigen necessària,*
b) *la quantitat d'aigua obtinguda.*

Dades: $M(H) = 1$; $M(O) = 16$



$$\text{a) } 10 \text{ g H}_2 \cdot \frac{1 \text{ mol H}_2}{2 \text{ g H}_2} \cdot \frac{1 \text{ mol O}_2}{2 \text{ mols H}_2} \cdot \frac{32 \text{ g O}_2}{1 \text{ mol O}_2} = 80 \text{ g O}_2$$

$$\text{b) } 10 \text{ g H}_2 \cdot \frac{1 \text{ mol H}_2}{2 \text{ g H}_2} \cdot \frac{2 \text{ mols H}_2\text{O}}{2 \text{ mols H}_2} \cdot \frac{18 \text{ g H}_2\text{O}}{1 \text{ mol H}_2\text{O}} = 90 \text{ g H}_2\text{O}$$

■ EXERCICIS

Per obtenir alumini es tracta l'òxid d'alumini –contingut en la roca anomenada *bauxita*– amb carboni. Juntament amb el metall s'obté diòxid de carboni.

- a) Escriviu l'equació química corresponent.
b) Quants grams de metall s'obtenen amb 500 g d'òxid d'alumini?

El gas natural es compon bàsicament de metà (CH_4). Quan crema en presència d'oxigen dona diòxid de carboni i vapor d'aigua. Tots els reactius i els productes es troben en forma gasosa. Calculeu la quantitat de CO_2 produïda en cremar 500 g de combustible.

Trobeu, sabent que el monòxid de nitrogen es pot descompondre en nitrogen i oxigen, quina quantitat de nitrogen i quina quantitat d'oxigen s'obté a partir de 60 g de compost.

☞ EXEMPLES DE PROBLEMES RESOLTS:

CÀLCULS ESTEQUIOMÈTRICS AMB VOLUMS DE GASOS EN CONDICIONS NORMALS.

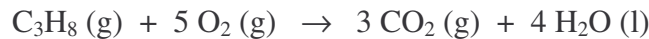
Un quilogram de propà es crema en presència d'oxigen, en condicions normals de pressió i temperatura. Calculeu:

a) quants grams d'oxigen atmosfèric es necessiten,

b) quantes molècules de vapor d'aigua s'obtenen,

c) quin volum, en cm^3 , de diòxid de carboni es produeix.

Dades: $M(\text{H}) = 1$; $M(\text{O}) = 16$; $M(\text{C}) = 12$, $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$



$$1 \text{ kg C}_3\text{H}_8 \cdot \frac{1000 \text{ g C}_3\text{H}_8}{1 \text{ kg C}_3\text{H}_8} \cdot \frac{1 \text{ mol C}_3\text{H}_8}{44 \text{ g C}_3\text{H}_8} \cdot \frac{5 \text{ mols O}_2}{1 \text{ mol C}_3\text{H}_8} \cdot \frac{32 \text{ g O}_2}{1 \text{ mol O}_2} = 3636,36 \text{ g O}_2$$

$$1 \text{ kg C}_3\text{H}_8 \cdot \frac{1000 \text{ g C}_3\text{H}_8}{1 \text{ kg C}_3\text{H}_8} \cdot \frac{1 \text{ mol C}_3\text{H}_8}{44 \text{ g C}_3\text{H}_8} \cdot \frac{4 \text{ mols H}_2\text{O}}{1 \text{ mol C}_3\text{H}_8} \cdot \frac{6,02 \cdot 10^{23} \text{ molèc}}{1 \text{ mol H}_2\text{O}} = 5,47 \cdot 10^{25} \text{ molèc H}_2\text{O}$$

$$1 \text{ kg C}_3\text{H}_8 \cdot \frac{1000 \text{ g C}_3\text{H}_8}{1 \text{ kg C}_3\text{H}_8} \cdot \frac{1 \text{ mol C}_3\text{H}_8}{44 \text{ g C}_3\text{H}_8} \cdot \frac{3 \text{ mols CO}_2}{1 \text{ mol C}_3\text{H}_8} \cdot \frac{22,4 \text{ l CO}_2}{1 \text{ mol CO}_2} \cdot \frac{1000 \text{ cm}^3}{11 \text{ CO}_2} = 1527272 \text{ cm}^3 \text{ CO}_2$$

 EXERCICIS

Calculeu la quantitat de calç viva (CaO) que s'obtindrà a partir d'una tona de pedra calcària que té una riquesa en carbonat de calci del 72 %. Calculeu, també, el volum de diòxid de carboni en condicions normals de pressió i temperatura que és abocat a l'atmosfera.

Calculeu quin volum d'oxigen, en condicions normals, es necessita per a cremar 15 cm^3 de metà.

Quina quantitat de nitrít d'amoni caldrà descompondre, escalfant, per tal d'obtenir $5,0 \text{ dm}^3$ de nitrogen, mesurat en condicions normals de pressió i temperatura?

I si es varien les condicions a $20 \text{ }^\circ\text{C}$ i 750 mmHg de pressió?

☉ EXEMPLES DE PROBLEMES RESOLTS:

CÀLCULS ESTEQUIOMÈTRICS AMB VOLUMS DE GASOS EN ALTRES CONDICIONS.

Quina quantitat de nitrit d'amoni caldrà descompondre, escalfant, per tal d'obtenir 5,0 dm³ de nitrogen, mesurat en condicions normals de pressió i temperatura?

I si es variien les condicions a 20 °C i 750 mmHg de pressió?

Dades: $M(H) = 1$; $M(O) = 16$; $M(N) = 14$, $R = 0,082 \text{ atm}\cdot\text{l}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$



En condicions normals:

$$5 \text{ dm}^3 \text{ N}_2 \cdot \frac{11 \text{ N}_2}{1 \text{ dm}^3 \text{ N}_2} \cdot \frac{1 \text{ mol N}_2}{22,41 \text{ N}_2} \cdot \frac{1 \text{ mol NH}_4\text{NO}_2}{1 \text{ mol N}_2} \cdot \frac{64 \text{ g NH}_4\text{NO}_2}{1 \text{ mol NH}_4\text{NO}_2} = 14,29 \text{ g NH}_4\text{NO}_2$$

En altres condicions:

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T \Rightarrow \frac{750}{760} \cdot 5 = n \cdot 0,082 \cdot (20 + 273) \Rightarrow n = 0,205 \text{ mols N}_2$$

$$0,205 \text{ mols N}_2 \cdot \frac{1 \text{ mol NH}_4\text{NO}_2}{1 \text{ mol N}_2} \cdot \frac{64 \text{ g NH}_4\text{NO}_2}{1 \text{ mol NH}_4\text{NO}_2} = 13,14 \text{ g NH}_4\text{NO}_2$$

 EXERCICIS

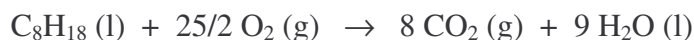
En moltes drogueries venen sulfumant, que és com es coneix una solució d'àcid clorhídric concentrat. Sobre una planxa de zinc, hi cauen 10 cm³ de sulfumant, la riquesa del qual en àcid clorhídric és del 33 % i la densitat 1,18 g/cm³.

Calculeu el volum d'hidrogen que s'ha després si les condicions ambientals eren de 22 °C i 740 mmHg de pressió atmosfèrica.

El policlorur de vinil, PVC, és l'únic plàstic de gran consum que conté clor. La seva fabricació passa per obtenir el clorur de vinil, VC, a partir d'etilè i clor, amb despreniment de clorur d'hidrogen, abans de la seva polimerització al PVC.

Si es vol obtenir 1 tona de clorur de vinil, quants m³ de clor a 25 °C i 10⁵ Pa es necessiten?

Generalment, les reaccions finalitzen en acabar-se almenys un dels reactius.
 → Exceptuant algunes reaccions (reversibles) que s'estudiaran més endavant.
 Per exemple, en la reacció de combustió de la gasolina d'un cotxe:



la reacció s'acaba quan ja no queda gasolina, ja que l'oxigen està en abundància en l'atmosfera i no limita cap reacció de combustió si es realitza a l'aire lliure.

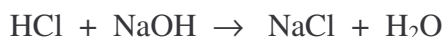
Així doncs, quan les reaccions químiques tenen més d'un reactiu, la substància reaccionant que s'acaba primer és el **reactiu limitant** perquè determina la fi de la reacció. L'altra o les altres substàncies reaccionants, que no s'egoten en el transcurs de la reacció, són els **reactius en excés**.

El mètode general utilitzat per resoldre els exercicis teòrics o pràctics és igual al que s'ha fet servir fins ara. Únicament caldrà tenir en compte, en l'inici dels càlculs estequiomètrics, quina és la substància que s'exhaureix abans –reactiu limitant–.

☞ EXEMPLES DE PROBLEMES RESOLTS:
 REACTIU LIMITANT I REACTIU EN EXCÉS.

*Es fan reaccionar 100 g d'hidròxid de sodi amb 150 g d'àcid clorhídric.
 Calculeu la quantitat de clorur de sodi que s'obté.*

Dades: M (H) = 1; M (O) = 16; M (Na) = 23; M (Cl) = 35,5



$$\left. \begin{array}{l} 100 \text{ g NaOH} \cdot \frac{1 \text{ mol NaOH}}{40 \text{ g NaOH}} = 2,5 \text{ mols NaOH} \Rightarrow \text{reactiu limitant} \\ 150 \text{ g HCl} \cdot \frac{1 \text{ mol HCl}}{36,5 \text{ g HCl}} = 4,1 \text{ mols HCl} \Rightarrow \text{reactiu en excés} \end{array} \right\} \text{proporció 1 mol : 1 mol}$$

$$2,5 \text{ mols NaOH} \cdot \frac{1 \text{ mol NaCl}}{1 \text{ mol NaOH}} \cdot \frac{58,5 \text{ g NaCl}}{1 \text{ mol NaCl}} = 146,25 \text{ g NaCl}$$

☞ EXERCICIS

Es fan reaccionar 100 g de propè, a 2,5 atm i 27 °C, amb 5 g d'hidrogen.
 Quin volum de propà s'obté en la corresponent reacció d'hidrogenació?

El propí és un hidrocarbur gasós que s'empra com a reactiu intermediari en síntesi orgànica i també com a combustible espacial.

A 390 K i 1 atm, es tenen 100 l de propí i 50 l d'oxigen. Quants litres hi haurà en finalitzar la reacció?

☞ EXEMPLES DE PROBLEMES RESOLTS:
REACTIUS EN DISSOLUCIÓ.

Es pren una mostra de 20 cm^3 d'una dissolució aquosa de cromat de potassi i s'hi afegeix la quantitat necessària de nitrat de plom (II), amb la qual cosa s'obté el precipitat de cromat de plom (II), que és utilitzat en pintures com a pigment de color groc. Una vegada s'ha filtrat i dessecat, el precipitat pesa –ja deduït el pes del paper de filtre– 1,94 g.

Trobeu la molaritat de la solució inicial de cromat de potassi.

Dades: $M(\text{Pb}) = 207,2$; $M(\text{O}) = 16$; $M(\text{Cr}) = 52$



$$1,94 \text{ g PbCrO}_4 \cdot \frac{1 \text{ mol PbCrO}_4}{323,2 \text{ g PbCrO}_4} \cdot \frac{1 \text{ mol K}_2\text{CrO}_4}{1 \text{ mol PbCrO}_4} = 0,006 \text{ mols K}_2\text{CrO}_4$$

La molaritat de la solució inicial es calcula :

$$\frac{0,006 \text{ mols K}_2\text{CrO}_4}{20 \text{ cm}^3 \text{ solució}} \cdot \frac{1000 \text{ cm}^3}{1 \text{ l solució}} = 0,3 \text{ M}$$

☞ EXERCICIS

Per neutralitzar exactament 10 cm^3 d'una solució d'hidròxid de calci, que es coneix com a aigua de calç, s'han addicionat gota a gota $6,3 \text{ cm}^3$ d'àcid nítric $1,5 \text{ mol/l}$ fins que l'indicador ha virat (canviat de color).

Calculeu:

- La quantitat d'òxid de calci que contenen els 10 cm^3 d'aigua de calç.
- La molaritat de la solució d'hidròxid de calci.

Quin volum de diòxid de carboni, a $1,2 \text{ atm}$ i $20 \text{ }^\circ\text{C}$, s'obté en reaccionar 50 g d'hidrogencarbonat de sodi amb àcid clorhídric?

Determineu, també, el volum mínim necessari d'àcid clorhídric concentrat de riquesa del 33% i densitat $1,45 \text{ g/cm}^3$.

3.2 LLEI DE CONSERVACIÓ DE LA MASSA O LLEI DE LAVOISIER

Al final del segle XVIII el francès Antoine Laurent Lavoisier, fent mesures molt exactes de reaccions que tenien lloc en recipients hermètics, va descobrir i va enunciar **la llei de conservació de la massa o llei de Lavoisier**:

En un canvi químic, la massa total dels reactius és igual a la massa total dels productes, és a dir, la massa es conserva.

→ Com a excepcions a la llei de Lavoisier hi ha els processos de fissió (bomba atòmica i centrals nuclears) i de fusió (bombes d'hidrogen).

👁️ EXEMPLES DE PROBLEMES RESOLTS:

LLEI DE CONSERVACIÓ DE LA MASSA O LLEI DE LAVOISIER.

50 g de carbonat de calci es descomponen tèrmicament en òxid de calci (sòlid) i diòxid de carboni (gas).

Apliqueu i comproveu la llei de Lavoisier.

Dades: $M(\text{Ca}) = 40$; $M(\text{O}) = 16$; $M(\text{C}) = 12$



$$50 \text{ g CaCO}_3 \cdot \frac{1 \text{ mol CaCO}_3}{100 \text{ g CaCO}_3} \cdot \frac{1 \text{ mol CaO}}{1 \text{ mol CaCO}_3} \cdot \frac{56 \text{ g CaO}}{1 \text{ mol CaO}} = 28 \text{ g CaO}$$

$$50 \text{ g CaCO}_3 \cdot \frac{1 \text{ mol CaCO}_3}{100 \text{ g CaCO}_3} \cdot \frac{1 \text{ mol CO}_2}{1 \text{ mol CaCO}_3} \cdot \frac{44 \text{ g CO}_2}{1 \text{ mol CO}_2} = 22 \text{ g CO}_2$$

Massa total de reactius : 50 g CaCO₃
Massa total de productes : 28 g CaO + 22 g CO₂ } comprovació de la llei de Lavoisier

📄 Les LLEIS FONAMENTALS DE LA QUÍMICA ocupen un espai molt destacat com a inici de la química moderna. Sorgeixen per la introducció de la mesura en els plantejaments químics, és a dir, en el moment que es comencen a quantificar els processos químics. A més de la *llei de conservació de la massa o llei de Lavoisier* (1785), cal destacar les següents lleis i hipòtesis:

- Llei de les proporcions definides o llei de Proust* (1801).
- Llei de les proporcions múltiples o llei de Dalton* (1803).
- Llei de Gay-Lussac o llei dels volums de combinació* (1808).
- Hipòtesi d'Avogadro i el nombre d'Avogadro*.

✳ EXERCICIS

Es barregen 10 g de la substància A, amb 8 g de la substància B, i es deixen reaccionar. El compost B reacciona totalment i s'obtenen 12 g de la substància C.

Quina part del compost A queda per reaccionar?

Es cremen 150 g d'età (C_2H_6) en presència d'oxigen i s'obté diòxid de carboni i vapor d'aigua.

- a) Escriviu i igualeu la corresponent reacció de combustió.
- b) Apliqueu i comproveu la llei de conservació de la massa.

3.3 RENDIMENT EN LES REACCIONS QUÍMIQUES

Quan es planeja una experimentació en un laboratori o en una indústria es realitzen, en primer lloc, uns **càlculs teòrics** respecte a la quantitat de producte que s'espera produir o respecte a la quantitat de reactiu que es preveu necessitar; tot seguit, es passa a l'experimentació pròpiament dita.

Difícilment la pràctica coincideix amb la teoria i el que succeeix habitualment és que s'obté menys producte o es necessita més reactiu del que s'havia previst inicialment en les càlculs teòrics. Això és degut al fet que no existeix una conversió total dels reactius en els productes desitjats. Els motius més importants d'aquesta transformació parcial són:

- ✓ que es produeixen reaccions secundàries per donar altres productes no desitjats,
- ✓ que hi hagi impureses als reactius,
- ✓ que la reacció sigui d'equilibri,
- ✓ que es donin pèrdues en el procés de separació del producte de la mescla de la reacció.

L'eficiència d'una reacció química es mesura calculant el seu **rendiment**, ja sigui màssic o tèrmic, que es pot definir com:

$$\text{Rendiment màssic} = \frac{\text{massa real}}{\text{massa teòrica}} \cdot 100 \quad \text{Rendiment tèrmic} = \frac{\text{calor real}}{\text{calor teòrica}} \cdot 100$$

on: la massa real és la que s'obté al final de l'experimentació,
la massa teòrica és la que surt d'aplicar els càlculs estequiomètrics a la reacció,
la calor real representa l'energia tèrmica aprofitable,
la calor teòrica és la que surt d'aplicar els càlculs a la reacció.

☞ EXEMPLES DE PROBLEMES RESOLTS: RENDIMENT EN LES REACCIONS QUÍMIQUES.

Una estufa de gas butà (C_4H_{10}) té un rendiment tèrmic del 60 %.
Calculeu la quantitat de calor aprofitable que es desprèn en cremar el contingut d'una bombona de 50 l de capacitat, en condicions normals de pressió i temperatura.
Dada: potència calorífica del butà = 10,97 kcal/g



$$50 \text{ l } C_4H_{10} \cdot \frac{1 \text{ mol } C_4H_{10}}{22,41 \text{ l } C_4H_{10}} \cdot \frac{58 \text{ g } C_4H_{10}}{1 \text{ mol } C_4H_{10}} \cdot \frac{10,97 \text{ kcal}}{1 \text{ g } C_4H_{10}} \cdot \frac{4,18 \text{ kJ}}{1 \text{ kcal}} = 5936,5 \text{ kJ teòrics}$$

$$5936,5 \text{ kJ teòrics} \cdot \frac{60 \text{ kJ aprofitables}}{100 \text{ kJ teòrics}} = 3561,9 \text{ kJ aprofitables}$$

8 EXERCICIS

El N_2O , anomenat gas hilarant, causa histèria i inconsciència quan s'inhala. S'utilitza, en algunes ocasions, per anestèsies de curta durada. Aquest gas s'obté a partir de la reacció de descomposició:



Calculeu la massa d'òxid de dinitrogen produïda a partir de 10 g de nitrat d'amoni si el rendiment màssic de la reacció és del 98 %.

L'aspirina, àcid acetilsalicílic, és un medicament que té propietats analgèsiques, antipirètiques i anticoagulants, entre d'altres. Aquestes característiques fan que aquest producte centenari sigui el més àmpliament utilitzat en tot el món. La seva obtenció es realitza a partir de l'àcid salicílic, $\text{C}_7\text{H}_6\text{O}_3$, fins a obtenir àcid acetilsalicílic, $\text{C}_9\text{H}_8\text{O}_4$, en una reacció mol a mol.

Calculeu el rendiment màssic de la reacció si a partir de 4,14 kg d'àcid salicílic s'obtenen 3,4 kg d'aspirina.

La majoria dels reactius comercials no són purs, és a dir, no són del 100 % en el compost. Les anomenades *impureses*, productes barrejats amb la substància principal, són presents habitualment en aquests reactius i cal tenir-les en compte a l'hora de planificar un exercici o una pràctica de laboratori.

→ Normalment la **puresa del reactiu** queda reflectida en l'etiqueta del compost en forma de tant per cent en pes. Per exemple, carbur de calci 75 %.

Un altre cas es troba en les menes, que són minerals que s'utilitzen com a primera matèria per tal d'extreure'n algun metall.

→ Per exemple, la *galena* és una mena del plom on el mineral que s'usa és el sulfur de plom (II), PbS , d'una puresa aproximada del 80 %. Altres exemples són la *pirita* (mena del ferro) i la *bauxita* (mena de l'alumini).

Els problemes en què els reactius no són purs no tenen més complicació que la de tenir cura de convertir la quantitat inicial impura en pura, perquè l'única part que reacciona és aquesta. Això es realitza aplicant el tant per cent en pes en el corresponent factor de conversió.

☉ EXEMPLES DE PROBLEMES RESOLTS:
PURESA DELS REACTIUS.

L'acetilè (etí) és un gas que s'obté deixant gotejar aigua sobre carbur de calci (CaC_2).
Quin volum d'acetilè, a 740 mmHg i 30 °C, s'ha obtingut en reaccionar amb aigua mig
quilo de carbur de calci de puresa del 90 %?



$$500 \text{ g mostra} \cdot \frac{90 \text{ g CaC}_2}{100 \text{ g mostra}} \cdot \frac{1 \text{ mol CaC}_2}{64 \text{ g CaC}_2} \cdot \frac{1 \text{ mol C}_2\text{H}_2}{1 \text{ mol CaC}_2} = 7,03 \text{ mols C}_2\text{H}_2$$

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T \Rightarrow V = \frac{n \cdot R \cdot T}{p} = \frac{7,03 \cdot 0,082 \cdot (30 + 273)}{740/760} = 179,41 \text{ C}_2\text{H}_2$$

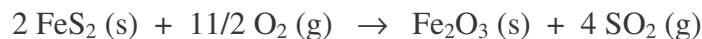
☐ EXERCICIS

Trobeu el volum de diòxid de carboni en condicions normals que s'obté en la combustió d'1 kg de carbó del 62 % de riquesa en carboni.

Quina quantitat mínima d'aire serà necessària?

L'aire conté el 20 % en pes d'oxigen.

La pirita és el sulfur més abundant a l'escorça terrestre i l'Estat Espanyol és un dels països amb més reserves d'aquest mineral. A primera vista, a causa de la seva coloració groga, es pot confondre amb l'or, per això en alguns llocs se l'anomena *l'or dels ximplers*. L'escalfament de la pirita en presència d'aire dóna lloc a la següent reacció:



L'òxid de ferro s'utilitza per a la producció de ferro i el diòxid de sofre per a la fabricació d'àcid sulfúric.

Si es disposa de 500 kg de pirita del 80 % de riquesa, calculeu:

a) Quants kg d'òxid de ferro es produiran?

b) Quants litres de diòxid de sofre s'obtenen a 1 atm i 25 °C?

Una mostra de 10,55 g de carbur de calci comercial, en reaccionar amb aigua, desprèn 2,88 dm³ d'acetilè mesurats a 20 °C i 1 atm.

Quin és el tant per cent de puresa en CaC_2 de la mostra comercial?

3.4 DETERMINACIÓ DE FÓRMULES EMPÍRIQUES I MOLECULARS

La **fórmula empírica** és la relació més senzilla, amb nombres enters, entre els àtoms d'una molècula.

→ Per exemple, propà: C₃H₈, butà: C₂H₅.

La **fórmula molecular** d'una substància informa dels elements químics que integren la molècula i del nombre real d'àtoms de cadascun d'ells.

→ Per exemple, propà: C₃H₈, butà: C₄H₁₀.

Per a determinar la fórmula empírica d'un compost cal seguir els següents passos:

- ① Identificar els elements que formen part del compost.
- ② Determinar les quantitats (màssiques) de cada element del compost.
- ③ Dividir la quantitat de cada element per la seva massa atòmica: s'obtenen els mols.
- ④ Dividir tots els valors anteriors pel més petit, de manera que s'estableix la relació numèrica d'àtoms de cada element del compost respecte a un d'ells.
- ⑤ Aquests valors determinen els subíndexs de cada element a la fórmula empírica. Si no són enters, es multipliquen totes les quantitats per 2, 3..., fins a aconseguir que ho siguin.

👁️ EXEMPLES DE PROBLEMES RESOLTS:

DETERMINACIÓ DE LA FÓRMULA EMPÍRICA D'UN COMPOST.

La pirolusita és el mineral més important del manganès, en el qual està en forma d'òxid. Determineu la fórmula empírica d'aquest òxid de manganès, si en realitzar una anàlisi s'obté un contingut en metall del 63,20 %.

Si es parteix de 100 g d'òxid de manganès:



Es calculen els respectius mols dividint per la corresponent massa atòmica:

$$\text{Mn} \rightarrow \frac{63,20 \text{ g}}{54,94 \text{ g/mol}} = 1,15 \text{ mols} \quad \text{O} \rightarrow \frac{36,80 \text{ g}}{16 \text{ g/mol}} = 2,3 \text{ mols}$$

Finalment, es divideixen les quantitats anteriors pel valor més petit:

$$\text{Mn} \rightarrow \frac{1,15 \text{ mols}}{1,15 \text{ mols}} = 1 \quad \text{O} \rightarrow \frac{2,3 \text{ mols}}{1,15 \text{ mols}} = 2$$

La fórmula empírica del compost té, doncs, 2 àtoms d'oxigen per cada àtom de manganès, per tant, MnO₂.

La fórmula molecular és igual que l'empírica o un múltiple d'aquesta. Per a determinar la fórmula molecular cal seguir els següents passos:

- 1 Determinar, prèviament, la fórmula empírica.
- 2 Obtenir la massa molecular del compost.
- 3 Calcular la fórmula molecular.

☞ EXEMPLES DE PROBLEMES RESOLTS:

DETERMINACIÓ DE LA FÓRMULA MOLECULAR D'UN COMPOST.

La cafeïna és un important alcaloide de conegudes propietats estimulants. Es troba en el cafè i també en el te. La seva composició centesimal és:

C: 49,43 %,

H: 5,15 %,

N: 28,83 %,

i la resta d'oxigen.

Quan la cafeïna cristal·litza, ho fa juntament amb una molècula d'aigua i llavors la seva massa molecular és 212,21 g/mol.

Quina és la seva fórmula molecular?

Si es parteix de 100 g de cafeïna, coneguda la composició centesimal:

$$C \rightarrow 49,43 \text{ g} \quad H \rightarrow 5,15 \text{ g} \quad N \rightarrow 28,83 \text{ g} \quad O \rightarrow 16,59 \text{ g}$$

Es calculen els respectius mols dividint per la corresponent massa atòmica:

$$C \rightarrow \frac{49,43}{12} = 4,12 \quad H \rightarrow \frac{5,15}{1} = 5,15 \quad N \rightarrow \frac{28,83}{14} = 2,05 \quad O \rightarrow \frac{16,59}{16} = 1,04$$

Es divideixen les quantitats anteriors pel valor més petit:

$$C \rightarrow \frac{4,12}{1,04} \cong 4 \quad H \rightarrow \frac{5,15}{1,04} \cong 5 \quad N \rightarrow \frac{2,05}{1,04} \cong 2 \quad O \rightarrow \frac{1,04}{1,04} = 1$$

La fórmula empírica del compost és, doncs, **C₄H₅N₂O**, i la massa molecular d'aquesta fórmula és 97 g/mol ($4 \cdot 12 + 5 \cdot 1 + 2 \cdot 14 + 1 \cdot 16 = 97$ g/mol).

Per tal de calcular la massa molecular caldrà tenir en compte que la cafeïna cristal·litza juntament amb una molècula d'aigua, per tant:

$$\text{Massa molecular (cafeïna)} = 212,21 \text{ g/mol} - 18 \text{ g/mol (aigua)} = 194,21 \text{ g/mol}$$

Òbviament, en aquest cas, la fórmula molecular és un múltiple de l'empírica:

$$194,21 \text{ g/mol} = N \cdot 97 \text{ g/mol} \rightarrow N \cong 2$$

Finalment, la fórmula molecular de la cafeïna és el doble de l'empírica: **C₈H₁₀N₄O₂**.

👤 EXERCICIS

D'un compost orgànic desconegut, se n'agafa una mostra d'1,376 g i es crema en un corrent d'aire donant 3,003 g de diòxid de carboni i 1,640 g d'aigua.

Quina és la fórmula empírica? Anomeneu almenys un compost que compleixi aquesta fórmula.

La combinació d'una mostra de 0,785 g d'un compost orgànic, molt conegut en les nostres llars, produeix 1,500 g de CO₂ i 0,921 g de vapor d'aigua.

De quin compost es tracta si una mostra de 0,824 g, en l'estat vapor, ocupa un volum de 581,90 cm³ a la temperatura de 387 K i a la pressió de $9,9 \cdot 10^4$ Pa.