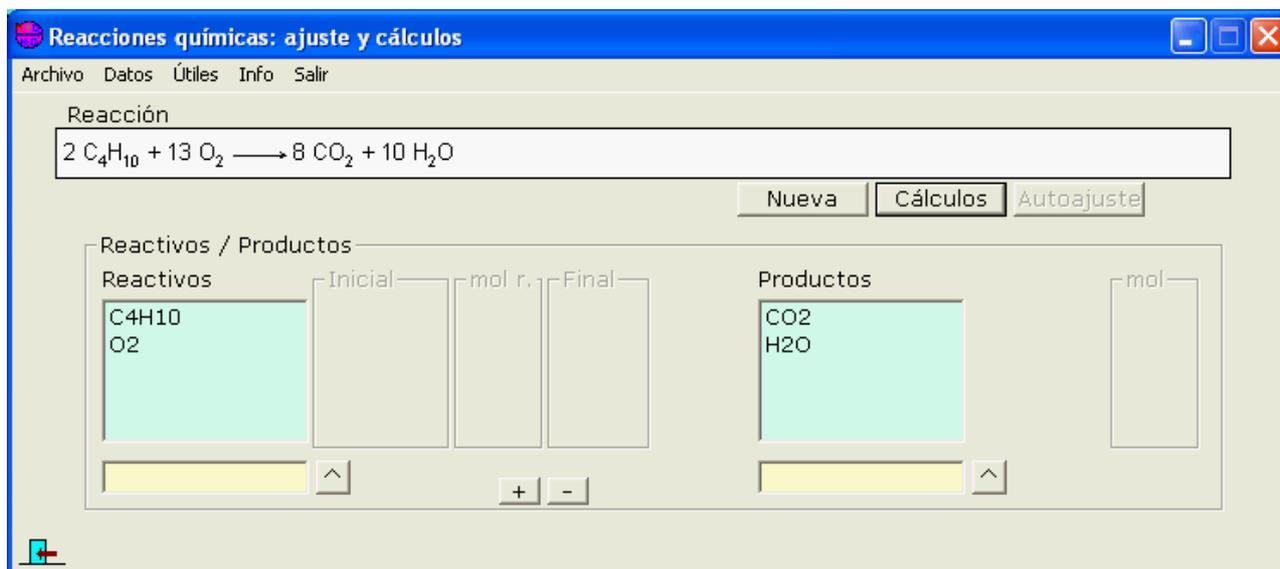


# REACK

## Ajuste y cálculos con ecuaciones químicas



- [Reacciones: incorporar / editar.](#)
- [Ajustar una reacción:](#)
- [Cálculos basados en una reacción:](#)
- [Problema](#)

## Reacciones: incorporar / editar.

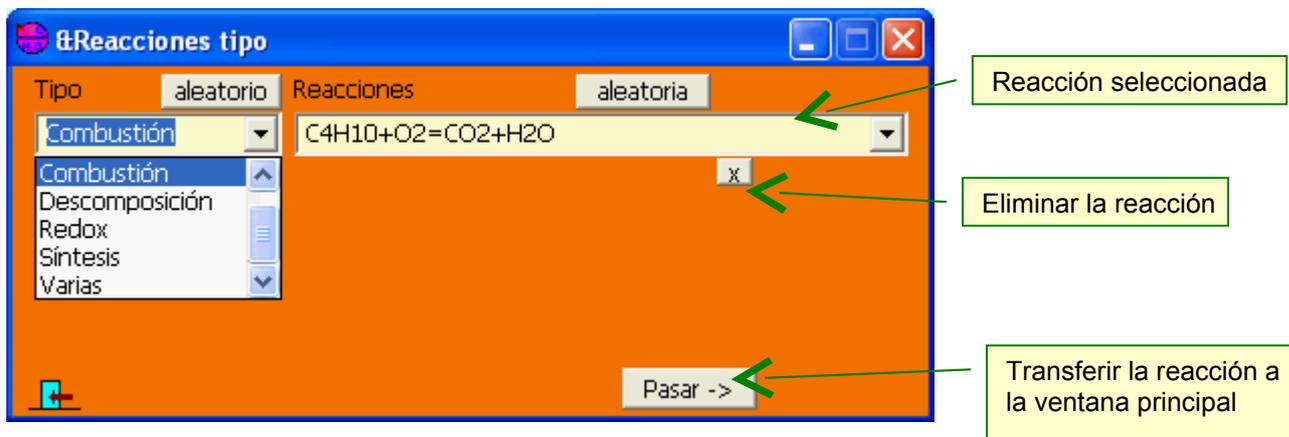
Sólo se tratará con reacciones “moleculares” (no iónicas parciales) y que contengan exclusivamente las fórmulas implicadas (no indicaciones de estado u otras)

- [Incorporar reacciones tipo o “standard”](#)
- [Construir /editar manualmente una reacción](#)

### Incorporar reacciones tipo o “standard”

Seleccionando en el menú **Archivo** la opción **Reacciones tipo...**

Se muestra la ventana que conecta con la base de datos de reacciones tipo



Además de la función principal de transferir la reacción al programa, aquí también se puede, tanto respecto a las reacciones mismas como a los grupos o tipos de ellas:

**Añadir:** introduciendo el nombre o la reacción en la casilla de edición y pulsando Return

**Modificar:** seleccionando un nombre o reacción, modificar y Return

**Eliminar:** seleccionar y pulsar el botón 

## Construir / editar manualmente una reacción

Introduciendo los reactivos (uno a uno, o todos de una vez) por un lado y los productos, por otro, se va formando la reacción...

Reacción

$\text{NaOH} + \text{H}_2\text{SO}_4 \longrightarrow \text{Na}_2\text{SO}_4 + \text{H}_2\text{O}$

Nueva Ajustar Autoajuste

Reactivos / Productos

Reactivos	Inicial	mol. r.	Final	Productos	mol.
NaOH H2SO4				Na2SO4 H2O	

NaOH+H2SO4 ^ + - Na2SO4+H2O ^

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 CaCl2 BaCl2 ZnCl2	

Transferir  
Editar  
Suprimir  
Nuevo

En la que tenemos 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

C<sub>4</sub>H<sub>10</sub> +  O<sub>2</sub> →  CO<sub>2</sub> +  H<sub>2</sub>O

Una vez introducidos, pulsando el botón  el programa verificará el ajuste y dará mensajes de error si no es correcto.

**Autoajuste:** Con el botón  el programa calculará los coeficientes.

Desde el punto de vista del aprendizaje no es una opción aconsejable, pero será útil para el caso en que se quiera pasar directamente a la fase de cálculos.

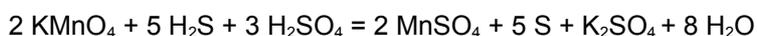
En cualquiera de los dos casos, se obtendrá la reacción ajustada:

Reacción

C<sub>4</sub>H<sub>10</sub> +  O<sub>2</sub> →  CO<sub>2</sub> +  H<sub>2</sub>O

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.

Pulsando después **OK** aparecerán los resultados en las casillas vacías, así como una nueva ventana conteniendo un esquema del “problema” formado:

REACTIVO	moles reac.	cantidad	exceso (= ini-reac.)
C4H10	0.003169 · 2 = 0.006338	· 58.1g/mol = 0.368262g	-> 0.631738 g

PRODUCTO	moles formados	cantidades
CO2	0.003169 × 8 = 0.025354	· 44g/mol = 1.12 g
H2O	0.003169 × 10 = 0.031692	· 18g/mol = 0.571092 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.