Enlaces Químicos

Electronegatividad

Mario Humberto González Dimas Juan David Hernández Hernández Alejandro Ramírez Serratos

Facultad de Ingeniería Civil, Carretera Coquimatlán Kilómetro 9, Coquimatlán 28,400, Coquimatlán, Colima,

[mgonzalez26@ucol.mx](mailto:mgonzalez26@ucol.mx) [aserratos0809@gmail.com.mx](mailto:aserratos0809@gmail.com.mx), [jhernadez14@ucol.mx](mailto:jhernadez14@ucol.mx),

Resumen

Se presenta la elaboración de un programa en Python para el cálculo de la electronegatividad de los elementos químicos, facilitando el nombramiento y conocimiento del tipo de enlace que se forma al combinar ciertos elementos de la tabla periódica. Enlaces como: Iónico, Covalente Polar y Covalente puro.

Los datos de la tabla serán tomados de una hoja de cálculo de Excel.

**Palabras clave**: Enlaces Químicos, Iónico, Covalente Polar, Covalente puro y Electronegatividad.

Abstract

The development of a program in Python is presented for the calculation of the electronegativity of the chemical elements, facilitating the appointment and knowledge of the type of link that is formed when combining certain elements of the periodic table. Links such as: Ionic, Polar Covalent and pure Covalent.

The data in the table will be taken from an Excel spreadsheet.

**Keywords**: Chemical bonds, Ionic, Polar Covalent, Pure Covalent and Electronegativity.

## Introducción

La química es la ciencia que se encarga de estudiar el comportamiento de la materia como: su composición y cada una de sus propiedades, incluyendo los cambios que experimenta al entrar en contacto con otras sustancias.

Este proyecto está ideado para crear una aplicación capaz solucionar pequeños problemas en este campo de estudio, dando pues la respuesta al nombre de los tipos de enlaces vistos en clase.

Los datos necesarios se encuentran en una hoja de cálculo con todos los elementos de la tabla periódica y el número de electrones de valencia de cada elemento.

En Python podemos llamar el archivo de Excel a través de librerías, la aplicación está ideada para que el usuario elija a su gusto los elementos de la hoja de cálculo en Python, mientras que Python realiza la resta de los electrones de valencia de tal modo que si dicha resta nos arroja un resultado igual a 0 el enlace dirá Covalente Puro, si el resultado es mayor a 0 pero menor a

2; el enlace dirá Iónico y si el resultado es igual o mayor a 2 el enlace dirá Covalente Polar.

Cabe mencionar que en esta resta siempre se elige primero cuál de los dos elementos seleccionados tiene mayor cantidad de electrones de valencia para que nuestro resultado siempre nos dé un número mayor o igual a 0. Después Python se encargará de hacer lo mencionado en el párrafo anterior.

## Desarrollo

Para utilizar este programa se tiene que usar un paquete de Python que proporciona estructuras de datos similares a los dataframes de R. el cual es pandas, depende de Numpy, la librería añade un potente tipo matricial.

1.- Se tiene que importar el programa para poder usarlo, ya que al importarlo se incorpora una aplicación objetos, documentos u otro tipo de archivos lo cual en este caso se tomaran datos de Excel.

2.- Para poder leer el programa se ocupa tener el archivo guardado en csv el cual los objetos de pandas permiten tanto leer datos en diversos formatos (read\_csv, read\_excel, read\_json, read\_html, read\_pickle….) como escribir en ellos (to\_csv, to\_excel, to\_json, to\_html, to\_pickle….). Permite incluso leer y escribir en el portapapeles (read\_clipboard, to\_clipboard)

Sep: el delimitador que divide los campos del csv

3.- Se imprimen los datos correspondientes para poder correr el programa

4.- Se especifica lo que se tiene que imprimir al llamar la columna o fila escogida.

5.- Para poder utilizar la entrada se ocupa que sea entero, entonces puede convertirse exitosamente a int y podemos decir que la entrada ingresada es un número, así que input permite obtener texto escrito por teclado.

6.- se denomina la formula a seguir para tener tu calculo correcto

7.- Para la estructura del programa se ocupa if, el cual os permite que el programa ejecute unas instrucciones cuando se cumplan una condición.

8.- Se pone el rango correspondiente para tener la lectura correspondiente de los valores en el rango

9.- Se imprime la suma adecuada para poder tener el resultado correcto y así obtener los diferentes enlaces químicos

10-. Se pone los elementos que quieras calcular

Y así lo repites las veces que quieras que te salga el enlace químico correspondiente del programa.

## Manejo de datos

El manejo de datos de este programa el cual tiene que ver con la química “enlaces químicos” con el que se obtendrán los diferentes sus enlaces correspondientes ya sea iónico o covalente, covalente polar, mediante Python 2.7 ya que se nos acomodaba más con la máquina que estamos usándola la cual tiene unas características con Windows 10, el cual cuenta con un sistema operativo de 64 bits.

Para que nuestro programa pueda funcionar se ocupó la librería panda, la cual como el archivo a importar es en Excel se ocupara la librería xlrd para leer los datos directamente de Excel.

Para leer los elementos se maneja como readElementos, por ellos es fundamental tener en claro.

Los comandos utilizados por pandas son para llamar las columnas de el archivo en Excel, créate.querry, ya que así se podrá importar solo la columna que llamamos.

Read.data es idispensable para llevar a cabo la impotancion correcta y teniendo las condiciones dichas en el programa se tendrá el resultado a esperar.

### **Conclusión**

Mario Gonzalez:

En este proyecto se vio como de buena manera se podría facilitar las cosas en la química para ello es fundamental tener en nuestro entorno se tendrá que utilizar la química en todos lados y teniendo en cuenta este programa, con mayor facilidad ya que importando datos se tendrá de manera correcta el resultado esperado. Sobre todo, que la tecnología la metemos a nuestro alcance y es lo

que los conlleva a tener más fáciles las cosas.

Alejando Serratos

Mediante la realización del proyecto logramos realizar un código mediante el desarrollo de un programa para poder realizar la suma de diferentes elementos químicos mediante su electronegatividad y con esto poder definir si la suma de estos elementos químicos es un enlace Iónico o un Enlace Covalente polar.

Este código fue desarrollado con el fin de poder facilitar la suma de estos elementos químicos y poder identificar el tipo de enlace y con esto poder satisfacer la necesidad de facilitar el trabajo de la realización sumas mediante la electronegatividad de los elementos químicos

David Hernández

Este proyecto nos ayudó a solucionar una problemática planteada, como materia, la programación tiene una amplia variedad de aplicaciones a soluciones. Es necesario tener un conocimiento del problema para saber que se querrá como resultado de dicha aplicación.

Lo que hoy en día tenemos a nuestro alcance se puede tomar en un entorno muy a favor de nosotros ya que con esta revolución tecnología tenemos a nuestros alcance muchas mas facilidades para poder explorar todo lo que queremos respecto a el estudio, tener un programa el cual te pueda calcular de buena manera los diferentes enlaces Químicos que se pueden calcular mediante la electronegatividad, se toma en cuenta en la química como algo indispensable que se tiene que tener de conocimiento básico, y con la ayuda de este tipos de programas de facilitaran para un mayor aprendizaje esperado de cada uno de nosotros los estudiantes.

### **Referencias**

Tabla de electronegatividad en la escala de Pauling

### **Link de consulta**

Consulta en GitHub:

<https://github.com/Alejandro480/Enlaces-Qumicos>

<https://github.com/Alejandro480/Enlaces-Qumicos/blob/master/Enlaces%20Quimicos.md>