Contenido

[1. Cifras significativas 3](#_Toc159519059)

[1.1. Números exactos e inexactos 3](#_Toc159519060)

[1.2. Reglas para la identificación y el conteo de cifras significativas 3](#_Toc159519061)

[1.3. Importancia de la notación científica 3](#_Toc159519062)

[1.4. Operaciones con cifras significativas 3](#_Toc159519063)

[1.4.1. Sumas y restas 3](#_Toc159519064)

[1.4.2. Multiplicaciones y divisiones 4](#_Toc159519065)

[1.4.3. Redondeo 4](#_Toc159519066)

[2. Teoría atómica 4](#_Toc159519067)

[2.1. Núcleo atómico 4](#_Toc159519068)

[2.1.1. Número atómico. 4](#_Toc159519069)

[2.1.2. Número másico 4](#_Toc159519070)

[2.2. Orbitales atómicos 5](#_Toc159519071)

[2.2.1. Número cuántico principal, n 5](#_Toc159519072)

[2.2.2. Número cuántico del momento angular, l (ele) 5](#_Toc159519073)

[2.2.3. Número cuántico magnético, ml 5](#_Toc159519074)

[2.2.4. Número cuántico de espín, ms. 5](#_Toc159519075)

[2.2.5. Tabla resumen número cuánticos 6](#_Toc159519076)

[2.3. Distribución electrónica 6](#_Toc159519077)

[2.3.1. Principio de exclusión de Pauli 6](#_Toc159519078)

[2.3.2. Principio de Aufbau 6](#_Toc159519079)

[2.4. Principio de máxima multiplicidad de Hund 6](#_Toc159519080)

[2.5. Diagrama de cajas de orbitales 6](#_Toc159519081)

[3. Masas atómicas 7](#_Toc159519082)

[3.1. Unidad de Masa Atómica 7](#_Toc159519083)

[3.2. Masas atómicas promedio 7](#_Toc159519084)

[4. La tabla periódica de los elementos 7](#_Toc159519085)

[4.1. Ordenación de la tabla periódica de los elementos 7](#_Toc159519086)

[4.2. Propiedades periódicas 8](#_Toc159519087)

[4.2.1. Radio atómico 8](#_Toc159519088)

[4.2.2. Energía de ionización (EI) 8](#_Toc159519089)

[4.2.3. Afinidad electrónica (AE) 9](#_Toc159519090)

[4.2.4. Electronegatividad 9](#_Toc159519091)

[5. Composición centesimal. Fórmulas empíricas y moleculares 10](#_Toc159519092)

[5.1. Composición centesimal 10](#_Toc159519093)

[5.2. Fórmula empírica 10](#_Toc159519094)

[5.3. Fórmula molecular 11](#_Toc159519102)

[6. Reacciones químicas 11](#_Toc159519103)

[6.1. Ecuaciones químicas 11](#_Toc159519104)

[6.2. Ley de Lavoisier 11](#_Toc159519105)

[6.3. Tipos de reacciones 11](#_Toc159519106)

[6.3.1. Reacciones de síntesis 11](#_Toc159519107)

[6.3.2. Reacciones de descomposición 11](#_Toc159519108)

[6.3.3. Reacción de combustión 12](#_Toc159519109)

[6.3.4. Reacción de neutralización ácido-base 12](#_Toc159519110)

[6.4. Determinación del reactivo limitante 12](#_Toc159519111)

[6.5. Rendimiento de una reacción. 12](#_Toc159519112)

[7. Enlace covalente 13](#_Toc159519113)

[7.1. Estructura de Lewis 13](#_Toc159519114)

[7.1.1. Carga formal 14](#_Toc159519115)

[7.1.2. Estructura de Lewis resonante 14](#_Toc159519116)

[7.1.3. Excepciones a la regla del octeto 15](#_Toc159519117)

[7.2. Geométrica molecular 16](#_Toc159519118)

[7.2.1. Teoría de Repulsión de los Pares de Electrones de la Capa de Valencia (RPECV) 16](#_Toc159519119)

[7.3. Enlace covalente polar y apolar 19](#_Toc159519120)

[7.4. Propiedades de los compuestos covalentes 20](#_Toc159519121)

[7.4.1. Sustancias moleculares covalentes 20](#_Toc159519122)

[7.4.2. Redes cristalinas covalentes 20](#_Toc159519123)

[8. Enlace iónico 20](#_Toc159519124)

[8.1. Análisis energético del enlace iónico 21](#_Toc159519125)

[8.1.1. Energía de ionización 21](#_Toc159519126)

[8.1.2. Afinidad electrónica 21](#_Toc159519127)

[8.1.3. Energía de red 21](#_Toc159519128)

[8.2. Propiedades de los compuestos iónicos 21](#_Toc159519129)

[9. Enlace metálico 22](#_Toc159519130)

[9.1. Propiedades de los materiales metálicos 22](#_Toc159519131)

# Energía

La energía de un sistema es su capacidad para producir trabajo o transferir calor.

## Trabajo

El trabajo implica aplicar una fuerza y gracias a ella realizar un desplazamiento. La fórmula del trabajo vista en física contempla varias posibilidades. Para este estudio, para simplificar, se va a considerar que el vector fuerza y el vector desplazamiento están en la misma dirección y lo vamos a calcular en valor absoluto y posteriormente le aplicaremos un criterio de signos.

Vamos así mismo a considerar el trabajo que realiza un gas que esté contenido en un cilindro con su tapa superior deslizante.

Dibujo de una persona

Descripción generada automáticamente con confianza baja

### Criterio de signos para el trabajo

* W<0 🡪 el sistema realiza trabajo contra el exterior 🡪 cede energía 🡪 el cilindro se expande.
* W>0 🡪 el exterior realiza trabajo contra el sistema 🡪 absorbe energía 🡪 el cilindro se comprime.

En esta situación el trabajo se define con la siguiente fórmula:

El trabajo calculado de este modo se denomina trabajo presión-volumen.

### Unidades de medida del trabajo

Las unidades son Pa·m3. Esta unidad es equivalente a la unidad que se usa habitualmente en física, el julio.

|  |
| --- |
| *Demostración* |

## Calor

### Calor sensible

Como ya se vio en el tema 1 el calor sensible es el calor que una sustancia intercambia cuando aumenta o disminuye su temperatura sin que eso suponga un cambio de estado. En esta situación el calor sensible se puede calcular usando la siguiente fórmula:

|  |  |
| --- | --- |
|  | Donde:  q es el calor que se está calculando.  m es la masa de la sustancia sobre la que se está aplicando la fórmula.  ce es el calor espécifico de la sustancia. Se mide en .  ΔT el la variación de temperatura. |

Nota: en adelante, en este tema se usará simplemente el término calor para referirse al calor sensible.

# Energía interna (U).

La energía interna (U) es esencialmente la energía que está contenida en un sistema el cuál se desea estudiar. La U es una magnitud extensiva, es decir, aumenta en función de la cantidad de materia presente. Por ello se suele usar como unidad de medida el KJ/mol\*.

También se puede expresar la variación de energía interna antes y después de un proceso, por ejemplo en una reacción química, gracias a la notación de incrementos:

\*Nota: las magnitudes pueden ser extensivas, como la mencionada energía interna o el volumen; pero también pueden ser intensivas, como por ejemplo, la densidad que no depende de la cantidad de materia presente.

# Primer principio de la termodinámica

El primer principio de la termodinámica expresa la frase ampliamente conocida: “la energía ni se crea ni se destruye”. Matemáticamente implica que si la U de un sistema varía es porque o bien habrá intercambiado trabajo o bien habrá intercambiado calor con el exterior.

## Variación de energía interna e intercambio de calor a volumen constante QV

La variación de la energía interna en un proceso, por ejemplo, en una reacción química es igual al calor intercambiado cuando la reacción se produce a volumen constante.

|  |
| --- |
| *Demostración*  *Como el volumen es constante, el trabajo es 0:*  *Si expresamos el calor a volumen constante como QV, la ecuación anterior quedará así:* |

# Entalpía

La entalpía se define del siguiente modo:

|  |  |
| --- | --- |
| En términos absolutos  Esta ecuación, aunque nos permite definir matemáticamente la entalpía, en la práctica no se usa, porque no se puede conocer la entalpía de una sustancia, si no su variación entre 2 estados diferente. Por eso se usa como se ve en la parte derecha de esta tabla. | Con incrementos |

## Entalpía como calor intercambiado a presión constante QP

La entalpía intercambiada en un proceso, por ejemplo, en una reacción química es igual al intercambio de calor de la reacción con el exterior cuando esta se produce a volumen constante.

# Cifras significativas

## Números exactos e inexactos

Los números exactos son números tales como los números enteros, las fracciones, las constantes matemáticas o las relaciones de equivalencia. Son números que no introducen incertidumbre y por lo tanto no limita el número de cifras significativas que puede tener un resultado, por ello se puede considerar que tiene infinitas cifras significativas.

Los números inexactos están relacionados con el resultado de mediciones y por lo tanto se les considera que tienen una precisión limitada. Éstos sí introducen limitaciones en cuanto a cifras significativas.

Ejemplo: si se desea medir un bolígrafo con una regla que alcanza hasta el milímetro y el resultado de la medición resulta 14,2 cm. El número de cifras significativas es 3. Podríamos expresar el número como:

Pero no sería correcto expresarlo como 14,20 cm porque se estaría dando a entender que la regla tenía precisión más allá del milímetro.

## Reglas para la identificación y el conteo de cifras significativas

* Los ceros a la izquierda no son cifras significativas:

Ejemplos: 0,2; 1 cifra significativa, el 2.

0,057; 2 cifras significativas, el 5 y el 7.

* Los ceros a la derecha sí cuentan como cifras significativas.

Ejemplos: el 20, tiene 2 cifras significativas, el 2 y el 0.

0,030; tiene 2 cifras significativas el 3 y el 0 del final.

* Los ceros entre dígitos diferente de 0 son cifras significativas.

Ejemplo: 0,02060, 4 cifras significativas, el 2, el 0, el 6 y el 0 del final.

## Importancia de la notación científica

Es aconsejable el uso de notación científica porque elimina ambigüedades en la aplicación de las cifras significativas. Los números que expresan la notación científica no se tienen en cuenta como cifras significativas. Veámoslo con un ejemplo.

Queremos contar los millones de personas que cumplen una característica. Para referirnos a las personas usaremos 1 millón de personas, 2 millones de personas… Sería incorrecto expresar que 25.000.000 de personas cumplen esa característica porque estamos dando a entender que hay que exactamente 25 millones de personas y no por ejemplo 24.500.436, cuando en realidad lo que se está haciendo es saltar de millón en millón. Si se escribe el número así: 25.000.000, estamos escribiendo 8 cifras significativas cuando en realidad hay 2 cifras significativas. Quedaría perfectamente determinado si los expresáramos así:

## Operaciones con cifras significativas

### Sumas y restas

El resultado de una suma o resta no puede tener más cifras significativas a la derecha del punto decimal que el número que menos tenga:

### Multiplicaciones y divisiones

El resultado debe incluir el mismo número de cifras significativas que la medición con menos cifras significativas.

### Redondeo

* Si la cifra no significativa que se desea eliminar es menor que 5, la última cifra significativa no variará
* Si la cifra no significativa que se desea eliminar es mayor que 5, la última cifra significativa no aumentará 1
* En caso de que sea 5, se redondea a la última cifra significativa par más cercana

# Teoría atómica

Un átomo está formado por:

* Núcleo atómico, donde se encuentran los protones (p+) con carga positiva y los neutrones (n) sin carga.
* Electrones (e-), que orbitan alrededor del núcleo y tienen carga negativa.

## Núcleo atómico

Un núcleo atómico se representa de la siguiente manera:

|  |  |
| --- | --- |
|  | X representa un elemento cualquiera  A: número másico. Es el número de protones + neutrones  Z: número atómico. Número de protones |

### Número atómico.

Es el número de protones que tiene un elemento. Este número no puede variar, es fijo para cada elemento. Si se observa en la tabla, el helio (He) tiene número atómico 2, si en lugar de tener 2 protones tuviera 1, ya no sería He si no, H.

Texto

Descripción generada automáticamenteTexto

Descripción generada automáticamente

### Número másico

Es el número de protones más neutrones. Este número si puede variar. Dos núcleos de un mismo elemento con distinto número de neutrones se denominan isótopos.

Ejemplo: isótopos del hidrógeno:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Protio: 0 neutrones | Deuterio: 1 neutrón | Tritio: 2 neutrones |

## Orbitales atómicos

Los orbitales son el lugar que ocupan o pueden ocupar los electrones alrededor del núcleo. La mecánica cuántica define estos lugares como espacios probables donde pueden ser encontrados estos electrones. Es por ello por lo que estos orbitales tendrán formas geométricas. Las localizaciones posibles de los electrones quedan definidas por 4 números cuánticos.

### Número cuántico principal, n

Representa el nivel energético del orbital, esto es su distancia respecto al núcleo. Este número cuántico toma valores enteros positivos: 1, 2, 3…

### Número cuántico del momento angular, l (ele)

Una vez definido el nivel energético del orbital, éste puede tomar varias formas geométricas. Estas formas quedan definidas por el número cuántico l. l toma valores: 0, 1, 2, …, n-1.

Estos orbitales también pueden definirse por letras según la siguiente tabla

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **Valor de l** | 0 | 1 | 2 | 3 |
| **Nombre orbital** | s | p | d | f |

Veamos como ejemplo un orbital p que tendrá la siguiente forma.

Forma, Flecha

Descripción generada automáticamente

### Número cuántico magnético, ml

Representa la orientación del orbital. Toma los valores enteros: -l, …, 0, …, l. Por ejemplo, un orbital p, podrá tener 3 orientaciones: -1 (px), 0 (py), 1 (pz)

Diagrama

Descripción generada automáticamente

### Número cuántico de espín, ms.

Este número no hace referencia al orbital, si no, a la orientación del electrón en el seno del orbital. En un mismo orbital solo puede haber 2 electrones y estos deben tener orientaciones opuestas. Por convenio se usa 1/2 (↑) y -1/2 (↓) para referirse a estas orientaciones.

### Tabla resumen número cuánticos

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **n** | **l** | **ml** | **ms** |
| 1, 2, … | 0, 1, 2, …, n-1 | -l,…,-1, 0, 1, …, l | -1/2, 1/2 |

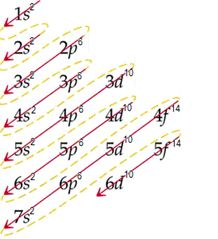
## Distribución electrónica

### Principio de exclusión de Pauli

Este principio afirma que no puede haber 2 electrones con los 4 números cuánticos iguales en un mismo átomo.

### Principio de Aufbau

Este principio responde al hecho de que los electrones deben ocupar primero los orbitales de menor energía. Se usa el diagrama de Möeler para recordar en que orden se van ocupando los orbitales.



Este diagrama de Möeler tiene algunas excepciones que es necesario saber. Las más habituales son las del Cr-Mo y Cu-Ag-Au, aunque se pueden encontrar más mirando la tabla periódica.

## Principio de máxima multiplicidad de Hund

Se definen orbitales degenerados aquellos que tienen el mismo nivel de energía. En este tipo de orbitales se tiene que cumplir el principio de máxima multiplicidad de Hund que afirma: en los orbitales degenerados, los electrones se distribuyen primeramente semiocupando todos los orbitales con todos sus espines paralelos (hacia arriba) antes de empezar a completar ningún orbital.

## Diagrama de cajas de orbitales

Los orbitales se suelen representar como cajas con su par de electrones dentro. Para dibujarlos, se sigue el siguiente método:

* Determinar el número de electrones: por norma general será igual al número de protones (Z) salvo que sea un ion. En ese caso se sigue la siguiente regla

Ejemplo F- (Z=9)

* Hacer la distribución electrónica como se vio en el punto 2.3.

Ejemplo F- (Z=9)

* Dibujar las cajas respetando la configuración electrónica y el principio de máxima multiplicidad de Hund.

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 1º Relleno los niveles 1s y 2s y semilleno los 2p | ↑↓ |  | ↑↓ |  | ↑ | ↑ | ↑ |
| 2º Completo el orbital 2px | ↑↓ |  | ↑↓ |  | ↑↓ | ↑ | ↑ |
| 3º Completo el orbital 2py | ↑↓ |  | ↑↓ |  | ↑↓ | ↑↓ | ↑ |
| 4º Completo el orbital 2pz | ↑↓ |  | ↑↓ |  | ↑↓ | ↑↓ | ↑↓ |
|  | 1s |  | 2s |  | 2px | 2py | 2pz |

# Masas atómicas

## Unidad de Masa Atómica

La Unidad de Masa atómica es igual a la doceava parte de la masa del isótopo C-12:

Usar umas para referirse a las masas de diferentes elementos implica dar las masas usando como referencia la masa del isótopo C-12.

También se puede usar la equivalencia entre uma y kg:

## Masas atómicas promedio

En realidad, las masas atómicas no son fijas para cada elemento, ya que en la naturaleza podemos encontrar diferentes isótopos, por lo tanto, las masas atómicas que aparecen en la tabla periódica son en realidad un promedio de las masas de todos los isótopos que se encuentran en la naturaleza para cada elemento. Ejemplo: los isótopos del cloro que se encuentran en la naturaleza responden a la siguiente tabla.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Isótopo** | **Abundancia en la naturaleza [%]** | **Masa atómica [uma]** |
|  | 75,78% | 34,969 |
|  | 24,22% | 36,969 |

La masa atómica promedio se calcula:

Puede comprobarse que ese valor coincide con el que aparece en la tabla periódica

Texto

Descripción generada automáticamente

# La tabla periódica de los elementos

## Ordenación de la tabla periódica de los elementos

La tabla periódica de los elementos comienza arriba a la izquierda con el hidrógeno (número atómico, Z=1) y cada vez que avanza una casilla hacia la derecha, Z aumenta 1.

A las filas de la tabla periódica se las llama periodos y a las columnas se las llama grupos.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | G |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | R |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | U |  |  |  |  |
| P | E | R | I | O | D | O | S |  |  |  |  |  | P |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | O |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | S |  |  |  |  |

La distribución electrónica determina en que columna irá cada elemento:

* Todos los elementos de un mismo grupo tienen el mismo número de electrones en la última capa. Sirva a modo de ejemplo que la distribución electrónica de los 2 primeros los elementos del grupo 17 acaban en ns2 np5 .

Texto, Código QR

Descripción generada automáticamente

* Todos los elementos de un mismo periodo tienen distribuciones electrónicas cuyo último electrón está en el mismo nivel energético. Sirva a modo de ejemplo que en el periodo 4, los primeros 4 elementos tienen distribuciones electrónicas cuyo último nivel es 4.

Tabla

Descripción generada automáticamente con confianza media

## Propiedades periódicas

### Radio atómico

Es el radio del átomo cuando está formando un enlace y es causado por la distancia de los electrones más externos al núcleo del átomo.

* El radio crece a medida que se desplaza hacia la izquierda en un periodo debido a que la carga nuclear positiva es menor y atrae a la nube electrónica con menor intensidad.
* El radio crece según se baja en un grupo, en tanto que aumenta el número cuántico n.

### Energía de ionización (EI)

Es la energía intercambiada por el átomo cuando éste pierde un electrón.

La anterior es la primera energía de ionización, si al ion resultante se le siguen extrayendo electrones tendremos la segunda energía de ionización y sucesivas.

* La energía de ionización aumenta hacia la derecha en un periodo.
* La energía de ionización aumenta hacia arriba en un grupo.
* Hay excepciones: Be-B, N-O.

Criterio de signos para el signo de la energía: + si el átomo absorbe energía. – si cede energía.

### Afinidad electrónica (AE)

Es la energía intercambiada por el átomo cuando éste pierde un electrón. La mayoría de los elementos liberan energía al ganar un electrón, por tanto, en la mayoría AE<0.

* La AE suele disminuir o aumentar en valor absoluto (algunos textos hablan de aumentar en el sentido de que cada vez son más negativas) hacia la derecha en un periodo. Pero hay excepciones bastante notables. El grupo 2 (el de Be) y el 15 (el de N) presentan AE mayores de las esperadas (o menores en valor absoluto) y no siguen esta regla, de hecho el Be, Mg y N tienen AE>0. Por otro lado, los gases nobles tienen todos AE>0.
* La AE suele disminuir o aumentar en valor absoluto hacia arriba en un grupo, pero también hay demasiadas excepciones

Criterio de signos para el signo de la energía: + si el átomo absorbe energía. – si cede energía.

### Electronegatividad

La electronegatividad es la tendencia de los átomos a atraer a los electrones cuando los átomos están formando parte de un enlace.

Puede confundirse con la afinidad electrónica, pero hay 2 diferencias fundamentales: la afinidad es una energía y la electronegatividad una fuerza y la electronegatividad solo se manifiesta cuando los electrones forman parte de un enlace.

Puede ser útil para resumir gráficamente estas propiedades observar el siguiente esquema:

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  |  |  | AE crece 🡪  EI crece 🡪 | | | | | | | | | |  |  |  |  |  |  |  |
| ← Radio crece |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | ← AE crece  ← EI crece |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | G |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | R |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | U |  |  |  |  |
| P | E | R | I | O | D | O | S |  |  |  |  |  | P |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | O |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | S |  |  |  |  |
| ← Radio crece | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |

# Composición centesimal. Fórmulas empíricas y moleculares

## Composición centesimal

Es el porcentaje que un compuesto tiene de cada elemento.

Por ejemplo: una muestra de 5,00 g de un compuesto está formada por 2,43 g C, 2,16 g O y 0,41 g H. Su composición centesimal será:

## Fórmula empírica

La fórmula empírica expresa la relación más simplificada posible de las proporciones entre los distintos elementos presentes en la molécula. Por ejemplo, para el butano (C4H10), la fórmula empírica será C2H5. Para determinar la fórmula empírica se debe seguir el siguiente procedimiento:

1. Determinar la composición centesimal siguiendo los conceptos vistos en el apartado 5.1. Este paso puede variar en cada problema. En algunos casos el problema puede dar ese dato directamente.
2. Suponer 100 g de compuesto
3. Pasar g a moles de cada elemento, teniendo en cuenta las masas molares. M(C)=12,0 g/mol, M(O)=16,0 g/mol, M(H)=1,01 g/mol
4. Dividir los moles de cada elemento entre el menor de todos ellos

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

1. Encontrar un número entero que al multiplicarlos por todos los resultados del paso 4 den como resultado otros números enteros

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

1. Expresar la fórmula empírica con estos números enteros: C3O2H6.

## Fórmula molecular

La fórmula molecular es el número real de átomos de cada elemento que tiene la molécula. Podemos usar el siguiente método:

1. Calcular la masa molar del compuesto. Este paso puede variar en cada problema. En algunos casos el problema puede dar ese dato directamente. Supongamos que la masa molar del compuesto anterior es 148,12 g/mol.
2. Calculamos la masa molar de la formula empírica
3. Como la fórmula molecular es un número entero de la fórmula empírica:

Luego la fórmula molecular será: (C3O2H6)2 🡪 C6O4H12

# Reacciones químicas

## Ecuaciones químicas

Una reacción química queda representada por una ecuación química mediante símbolos químicos y representa fundamentalmente las proporciones de cada sustancia que interviene en la reacción:

Las proporciones que intervienen de cada sustancia se dan o bien en moléculas o bien en moles, pero nunca se pueden interpretar en gramos. Es decir, en la ecuación anterior podemos decir que 1 mol de CH4 y 1 mol de O2 reaccionan para dar 1 mol de CO2 y 2 moles de H2O, también podemos decir que 1 molécula de CH4 y 1 molécula de O2 reaccionan para dar 1 molécula de CO2 y 2 moléculas de H2O. Lo que en ningún caso podemos decir es que ~~1 g de CH~~~~4~~ ~~y 1 g de O~~2 ~~reaccionan para dar 1 g de CO~~2 ~~y 2 g de H~~2~~O~~.

## Ley de Lavoisier

La ley de Lavoisier afirma que en una reacción la masa de los reactivos debe ser igual a la masa de los productos, es decir, se debe conservar la masa; la masa no se puede crear ni destruir en una reacción química.

Esto es algo que no ocurre con los moles, como se puede observar en la reacción del ejemplo anterior, en los reactivos hay 2 moles y en los productos 3.

## Tipos de reacciones

### Reacciones de síntesis

2 o más reactivos, 1 producto:

### Reacciones de descomposición

1 reactivo, 2 o más productos

### Reacción de combustión

Un combustible, que suele ser un compuesto con presencia de carbono e hidrógeno, reacciona con O2 para dar CO2 y H2O.

### Reacción de neutralización ácido-base

Se tiene un ácido, que es un compuesto que puede donar protones H+ y una base que puede aceptar esos protones en los reactivos, mientras que en los productos, se tiene una sal y agua.

## Determinación del reactivo limitante

Ya se había enunciado que las ecuaciones representan las proporciones en las que las sustancias intervienen en la reacción. ¿Qué pasa si hay una reacción en la que una sustancia no cumple esa relación por ejemplo porque tiene menos cantidad de materia? La reacción se detendrá cuando el reactivo que está en defecto se termine y sobrará el reactivo o los reactivos que estén en exceso. Al reactivo que está en defecto, se le llama reactivo limitante. A continuación, se va a ver con un ejemplo un método para calcular el reactivo limitante.

Ejemplo: se hacen reaccionar 20,0 g de Cl con 20,0 g Na para formar NaCl. ¿Cuál es el reactivo limitante?

Datos: M(Cl)=35,5 u; M(Na)=23,0 u

1. Hay que escoger o bien los 20 g de Cl y probar cuántos se serían necesarios de Na o bien los 20 g de Na y probar cuántos serían necesarios de Cl

1. Analizar el que esté en defecto es el limitante. En este caso, 20 g Cl reaccionan con 13 g Na, pero tenemos 20 g Na por lo tanto van a sobrar 20-13=7 g Na. El Na está en exceso y el Cl en defecto, el Cl por tanto es el reactivo limitante.

## Rendimiento de una reacción.

Las ecuaciones químicas representan de manera teórica las cantidades de materia que intervienen en una reacción química, sin embargo, en la práctica las cantidades de los productos son menores que las previstas en teoría. Se define el rendimiento:

En la práctica es más cómodo usar el rendimiento en factores de conversión.

Ejemplo: calcular los g de Na2S que se obtienen de 500 g Na2SO4 con un R=75,0% en la siguiente reacción:

Datos: M(Na)=23,0 u; M(S)=32,1 u; M(O)=16,0 u

Primero se calcularán las masas molares que sean necesarias:

A continuación, se calculará la masa pedida aplicando el rendimiento en el factor de conversión

# Enlace covalente

En este tipo de enlace 2 átomos se unen para compartir electrones de manera que ambos puedan cumplir el octeto, es decir, tener 8 electrones en la última capa. Suele ser un enlace que se da entre 2 átomos no metálicos. Por ejemplo, el átomo de H con 1 e-, necesitar otro e- para alcanzar su máxima estabilidad (recordemos que el H no cumple el octeto) y por lo tanto puede formar enlace covalente con otro H de modo de cada uno comparta su e- y así ambos van a estar rodeados de 2 e- formando así la molécula H2.

Forma, Flecha

Descripción generada automáticamente

## Estructura de Lewis

El diagrama anterior para la molécula de H2 se llama estructura de Lewis. Para moléculas sencillas como la anterior es muy sencillo realizar la estructura de Lewis, sin embargo, para moléculas más complejas veremos que es más difícil y es conveniente seguir una serie de pasos. Para ver esos pasos, se va a desarrollar un ejemplo.

Veamos el ejemplo de la molécula de O2, teniendo en cuenta, que O tiene Z=8.

Ejemplo: dibujar la estructura de Lewis de O2. Datos: O(Z=8).

El diagrama anterior para la molécula de H2 se llama estructura de Lewis. Para moléculas sencillas como la anterior es muy sencillo realizar la estructura de Lewis, sin embargo, para moléculas más complejas veremos que es más difícil y es conveniente seguir una serie de pasos. Para ver esos pasos, se va a desarrollar un ejemplo.

Veamos el ejemplo de la molécula de O2, teniendo en cuenta, que O tiene Z=8.

Ejemplo: dibujar la estructura de Lewis de O2. Datos: O(Z=8).

1. Determinar la distribución electrónica de todos los elementos y determinar los e- de valencia (de la última capa)
2. Determinar el total de los e- de valencia de que disponemos: 6·2=12 e- de valencia disponibles.
3. Determinar el total de los e- de valencia necesarios para que todos los elementos lleguen al octeto:
4. Determinar los pares de electrones que tienen que compartir para que todos lleguen al octeto

1. Determinar los pares de electrones no compartidos
2. Dibujar todos los elementos y unirlos entre si mediante enlaces simples. Para determinar las uniones, se pueden seguir unas pautas:

* el menos electronegativo suele ir en el centro.
* Las fórmulas moleculares pueden dar una pista de cómo se distribuyen los átomos.
* Para los oxianiones, los O rodean al átomo no metálico y enlazan con éste.

Icono

Descripción generada automáticamente con confianza baja

1. Realizar los enlaces necesarios cumpliendo con los pares de e- compartidos previstos en el paso 4 y los pares de e- no compartidos previstos en el paso 5.

Un dibujo de una cara feliz

Descripción generada automáticamente con confianza baja

### Carga formal

En algunas ocasiones es posible que se puedan plantear varias estructuras de Lewis para una misma molécula, para decidir cuál es la correcta, se define de manera teórica la carga formal para cada átomo de la siguiente manera:

Se trata de escoger de entre todas las estructuras posibles la que mejor responda a los siguientes criterios ordenados por orden de importancia:

1. Aquella con las cargas formales más próximas a 0.
2. Aquella que, en caso de haber cargas formales negativas, éstas estén sobre los átomos más electronegativos.

Para iones, los criterios anteriores siguen siendo válidos, pero hay que tener en cuenta que la suma de las cargas formales debe ser igual a la carga del ion.

Veamos como ejemplo las 2 estructuras de Lewis posibles del CO2:

|  |  |
| --- | --- |
| Un dibujo de una cara feliz  Descripción generada automáticamente con confianza baja  Carga formal O a la izquierda = 6 – 4 – 2 = 0  Carga formal C = 4 – 4 = 0  Carga formal O a la derecha = 6 – 4 – 2 = 0 | Un dibujo de una cara feliz  Descripción generada automáticamente con confianza baja  Carga formal O a la izquierda = 6 – 2 – 3 = +1  Carga formal C = 4 – 4 = 0  Carga formal O a la derecha = 6 – 6 – 1 = -1 |

La estructura de la izquierda cumple que tiene las cargas formales más próximas a 0 por lo tanto, esa es la correcta.

### Estructura de Lewis resonante

En algunas ocasiones hay varias estructuras que involucran enlaces múltiples que pueden ser válidas para una misma molécula, de manera que los enlaces múltiples vayan rotando de posición. En este caso se representan todas las posibilidades, aunque en realidad, en la naturaleza los enlaces son un híbrido entre todas las estructuras resonantes.

Ejemplo: realizar la estructura de Lewis de O3.

1. Determinar la distribución electrónica de todos los elementos y determinar los e- de valencia (de la última capa)
2. Determinar el total de los e- de valencia de que disponemos: 6·3=18 e- de valencia disponibles.
3. Determinar el total de los e- de valencia necesario para que todos los elementos lleguen al octeto:
4. Determinar los pares de electrones que tienen que compartir para que todos lleguen al octeto
5. Determinar los pares de electrones no compartidos
6. Dibujar todos los elementos y unirlos entre si mediante enlaes simples. Para más detalles ver punto 6 del apartado 7.1.

Imagen en blanco y negro

Descripción generada automáticamente con confianza baja

1. Realizar los enlaces necesarios cumpliendo con los pares de e- compartidos previstos en el paso 4 y los pares de e- no compartidos previstos en el paso 5.

Icono

Descripción generada automáticamente

1. Analizar la carga formal. Sale que el O de abajo tiene carga formal +1 y el de la derecha -1, lo cual da que pensar en hacer un doble enlace entre esos 2, de manera que ambos tengan 0. Esto dejaría al O con 10 e- y eso es algo que no puede ocurrir.
2. Como paso adicional hay que darse cuenta de que el doble enlace puede pasar del oxígeno de la izquierda al oxígeno de la derecha y la molécula seguirá siendo la misma. Esto es, son 2 estructuras resonantes que se representan del siguiente modo:

Imagen que contiene objeto, reloj

Descripción generada automáticamente

### Excepciones a la regla del octeto

* Número impar de electrones: en algunas ocasiones, el número de electrones disponibles es impar, esto implica que no se cumpla el octeto. En este caso, las cargas formales determinarán estructura correcta. Ejemplo NO.
* Excepción al octeto por defecto: el Be solo completa 4 electrones de valencia y el B 6. Esto es algo que se puede determinar por el estudio de las cargas formales.
* Excepción al octeto por exceso: esto es algo que solo ocurre del periodo 3 en adelante porque tienen orbitales d accesibles. Nuevamente las cargas formales determinarán la estructura correcta.

## Geométrica molecular

Muchas propiedades de los compuestos covalentes dependen de la forma geométrica que tenga la molécula. La estructura de Lewis solo ofrece información acerca del número y el tipo de enlaces, pero no ofrece información acerca de su forma geométrica.

### Teoría de Repulsión de los Pares de Electrones de la Capa de Valencia (RPECV)

Esta teoría es muy sencilla de enunciar; afirma que los pares de electrones (pares libres o pares enlazantes) se distribuirán lo más alejados posible unos de otros para evitar las fuerzas de repulsión eléctricas. Esto da lugar a las distintas formas geométricas que se pueden ver a continuación.

Se define dominio de electrones a cualquier agrupación de pares electrónicos bien sea porque formen parte de un enlace simple, múltiple o electrones libres no enlazantes. Por ejemplo un átomo con 2 enlaces múltiples tendrá 2 dominios de electrones, un dominio por cada enlace múltiple; un átomo con 1 enlace simple y uno doble, tendrá 2 dominios de electrones, un dominio por el enlace simple y otro por el enlace doble y un átomo con un enlace simple, uno doble y un par de electrones libres, tendrá 3 dominios de elctrones, uno para el enlace simple, otro para el doble y otro para el par libre.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Dominios** | **Dominios enlazantes** | **Dominios no enlazantes** | **Geometría** | **Ejemplo** | **Diagrama de Lewis** |
| 2 | 2 | 0 | Lineal | Dibujo animado de un personaje animado  Descripción generada automáticamente con confianza baja |  |
| 3 | 3 | 0 | Trigonal plana | Diagrama, Esquemático  Descripción generada automáticamente |  |
| 2 | 1 | Angular | Icono  Descripción generada automáticamente |  |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Dominios** | **Dominios enlazantes** | **Dominios no enlazantes** | **Geometría** | **Ejemplo** | **Diagrama de Lewis** |
| 4 | 4 | 0 | Tetraédrica | Diagrama, Esquemático, Icono  Descripción generada automáticamente  Representación en papel |  |
| 3 | 1 | Piramidal trigonal | Icono  Descripción generada automáticamente  Representación en papel |  |
| 2 | 2 | Angular | Un dibujo de una cara feliz  Descripción generada automáticamente con confianza media |  |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Dominios** | **Dominios enlazantes** | **Dominios no enlazantes** | **Geometría** | **Ejemplo** | **Diagrama de Lewis** |
| 5 | 5 | 0 | Bipiramidal trigonal | Imagen que contiene reloj, señal  Descripción generada automáticamente |  |
| 4 | 1 | Balancín | Diagrama, Esquemático  Descripción generada automáticamente  Representación en papel |  |
| 3 | 2 | Forma de T | Diagrama, Esquemático  Descripción generada automáticamente |  |
| 2 | 3 | Lineal | Una caricatura de una persona  Descripción generada automáticamente con confianza media |  |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Dominios** | **Dominios enlazantes** | **Dominios no enlazantes** | **Geometría** | **Ejemplo** | **Diagrama de Lewis** |
| 6 | 6 | 0 | Octaédrica | Diagrama, Esquemático  Descripción generada automáticamente |  |
| 5 | 1 | Piramidal cuadrada | Diagrama  Descripción generada automáticamente |  |
| 4 | 2 | Cuadrada plana | Diagrama  Descripción generada automáticamente |  |

## Enlace covalente polar y apolar

En una molécula con enlace covalente, la diferencia de electronegatividad entre los átomos intervinientes genera que un átomo atraiga al par electrónico con más intensidad que el otro. El resultado es que los electrones estén desplazados hacia un lado y en consecuencia la molécula tiene cierta carga eléctrica lo que hace que se convierta en un dipolo.

El momento dipolar expresa que tan desplazada está la nube electrónica y será tanto mayor cuanto mayor sea la diferencia de electronegatividades de los átomos intervinientes. Su fórmula es la siguiente:

|  |  |
| --- | --- |
|  | Donde:  μ: es el momento dipolar que estamos calculando.  δ: valor absoluto de la carga parcial. La molécula tiene 2 polos eléctricos con igual carga, pero diferente signo. Ese es el valor de la carga parcial.  d: distancia entre los átomos. |

Las moléculas serán polares si tienen enlaces polares, es decir enlaces entre átomos distintos, y estos no se anulan por geometría. Ejemplo:

Diagrama, Icono

Descripción generada automáticamente

Como se puede observar los 2 momentos dipolares se anulan el uno al otro del mismo modo que se anularían 2 vectores opuestos.

Tal vez pueda ser interesante memorizar estas dos cuestiones: las geometrías tetraédricas y trigonal plana anulan los momentos polares. El resto de las geometrías se deducen fácilmente.

## Propiedades de los compuestos covalentes

Hay que diferenciar 2 tipos de compuestos covalentes: las sustancias covalentes moleculares y las redes cristalinas covalentes.

### Sustancias moleculares covalentes

* Se pueden encontrar en los 3 estados de la materia.
* Las moléculas polares presentan altos punto de fusión y ebullición y son disolubles en disolventes polares y conducen la electricidad.
* Sin embargo, los apolares tienen características inversas: puntos de fusión y ebullición más bajas, solubles en disolventes apolares y no conducen la electricidad.

### Redes cristalinas covalentes

* Sólidos a temperatura ambiente y con temperaturas de fusión y ebullición elevada por las fuerzas de atracción de la red covalente.
* Las redes tridimensionales son duras e inflexibles y las redes bidimensionales son blandas
* No conducen la electricidad.
* Son insolubles.

# Enlace iónico

Mientras que en el enlace covalente los átomos comparten electrones, en el iónico, un átomo cede electrones y otro recibe esos electrones, de manera que con el intercambio ambos llegan al octeto. En tanto que los átomos ceden o absorben electrones se convierten en iones con carga eléctrica de modo que el enlace iónico es el enlace entre 2 iones, uno positivo (un elemento metálico) y otro negativo (un elemento no metálico) por atracción eléctrica. Esta unión es muy fuerte y los iones se disponen en una red cristalina muy ordenada. La fuerza con la que se atraen 2 iones se calcula con la ley de Coulomb:

## Análisis energético del enlace iónico

### Energía de ionización

Es necesario aportar energía a un átomo metálico para que se produzca el ion positivo. Pongamos el ejemplo de la formación del NaCl. Para extraer un electrón del elemento de Na se necesita aportar al elemento una energía de ionización de 496 kJ.

### Afinidad electrónica

También es necesario extraer energía para añadir un electrón a un átomo no metálico. Hay que recordar en este punto que la afinidad electrónica generalmente era negativa, esto significa que el átomo tiene que liberar energía para captar el electrón. En el ejemplo anterior el Cl tiene una afinidad electrónica de -349 kJ, es decir, libera 349 kJ cuando capta el electrón.

En suma, la ionización de los 2 elementos anteriores arroja un balance energético positivo, es decir, absorbe energía:

### Energía de red

La energía de red es la energía que 2 iones en estado gaseoso liberan cuando se juntan para formar un enlace iónico. Esto tiene una implicación importante: 2 iones separados tienen una energía mayor que los 2 iones juntos formando enlace iónico.

En el ejemplo anterior la energía de red del NaCl es -788 kJ. Esta energía de red es negativa, porque los iones al juntarse liberan energía. La energía neta intercambiada teniendo en cuenta la energía de ionización, la afinidad electrónica y la energía de red es:

Esto es algo que encaja con el hecho de que los átomos siempre se unen para pasar a un nivel menor de energía.

Nota: en la práctica el proceso no libera tanta energía ya que en la naturaleza el Na no se encuentra en estado gaseoso y el Cl no se encuentra aislado, si no, unido a otro elemento. Por lo tanto, habría que tener en cuenta el aporte de energía necesario para que el Na sólido pase a estado gaseoso y habría que aportar más energía para aislar el Cl.

Teniendo en cuenta la fórmula de la ley de Coulomb, la energía de red, crecerá con la carga de los iones y disminuirá con el radio de los iones.

## Propiedades de los compuestos iónicos

* Sólidos a temperatura ambiente y con temperaturas de fusión y ebullición elevadas porque las fuerzas de atracción de los iones son elevadas.
* Son duros, frágiles y poco flexibles por el mismo motivo que antes.
* No conducen la electricidad en estado sólido, porque los iones están muy ordenados e inmóviles en la red cristalina, pero sí disueltos o en estado líquido porque para ello hace falta desmoronar la red cristalina y los iones liberados pueden conducir la electricidad.
* Solubles en disolventes polares porque los dipolos del disolvente desharán la red cristalina.

# Enlace metálico

El enlace metálico presenta electrones en su orbital s o p más lejanos que tienen facilidad para separarse del núcleo y por tanto formar iones positivos, y permitir una nube electrónica que compense la carga positiva de los iones.

## Propiedades de los materiales metálicos

* Son sólidos a temperatura ambiente y tienen elevadas temperaturas de fusión y ebullición debido a la dificultad de romper la estructura ordenada a excepción del mercurio que es líquido.
* En general son duros, porque la estructura del enlace metálico es difícil de romper.
* Conducen la electricidad y el calor debido a la libertad de los electrones de la nube electrónica.
* Son moldeables y dúctiles (se pueden estirar).
* Reflejan gran parte de la luz que les llega lo que les aporta un aspecto brillante.