Resumen de clases

J. Clavijo & E. Romero

2022-07-08

Contents

A	erca Uso	5 5 5				
1	Cantidades físicas y cálculo de cantidades 7					
2	Equilibrio ácido-base 2.1 Soluciones reguladoras	9				
3	3.1 Chapters and sub-chapters	11 11				
4	Parts	15				
5	5.1 Footnotes	L 7 17 17				
6	6.1 Equations	19 19 19				
7	7.1 Publishing	21 21 21 21				
	orary(tidyverse)					

4 CONTENTS

Acerca

Este libro incluye el resumen de las clases de principios de análisis químico, al igual que la ampliación de los ejercicios trabajados en clase. sdf

Uso

Cada capítulo contendrá los diferentes temas vistos en clase divididos de acuerdo al programa calendario.

También incoporará la solución de ejercicios con la calculadora HP 48gx y 50g, al igual que en R.

Alcance

Este no pretende reemplazar los libros recomendados para la asignatura sino que es una material de apoyo para el estudio de los estudiantes de la asignatura de principios de análisis químico.

6 CONTENTS

Cantidades físicas y cálculo de cantidades

El valor de una cantidad física Q puede expresarse como el producto de un valor numérico $\{Q\}$ y una unidad [Q]

$$Q = \{Q\} [Q]$$

ni el nombre de la cantidad física, ni el símbolo utilizado para denotarla, implican una elección particular de la unidad 1 .

Las cantidades físicas, los valores numéricos y las unidades pueden manipularse con las reglas ordinarias del álgebra. Así podemos escribir, por ejemplo, para la longitud de onda λ de una de las líneas amarillas de sodio.

$$\lambda = 5.896 \times 10^{-7} \text{ m} = 589.6 \text{ nm}$$
 (1.1)

donde m es el símbolo de la unidad de longitud llamada metro, nm es el símbolo del nanómetro, y las unidades metro y nanómetro están relacionadas por:

$$1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$$
 (1.2)

La equivalencia de las dos expresiones para λ en la ecuación (1.1) se deduce de inmediato cuando tratamos las unidades según las reglas del álgebra y reconocemos la identidad de 1 nm y 10^{-9} m en la ecuación (1.2). La longitud de onda puede expresarse igualmente en la forma:

$$\lambda/m = 5.896 \times 10^{-7} \tag{1.3}$$

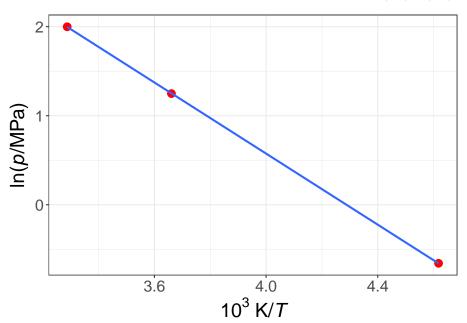
 $^{^1\}mathrm{El}$ símbolo [Q] se utilizaba antes para la dimensión de Q, pero este símbolo se utiliza y se prefiere para la unidad de Q.

Table 1.1: Recreating booktabs style table

$T/\text{text}\{K\}$ \$	\$10^{3}\\text{K}/T\$	$p/\text{text}\{MPa\}$	$\ln \left(\frac{p}{\text{MPa}\right)}$
216.55	4.6179	0.5180	-0.6578
273.15	3.6610	3.4853	1.2486
304.19	3.2874	7.3815	1.9990

o
$$\lambda/\mathrm{nm} = 589.6 \tag{1.4}$$

Puede ser útil trabajar con variables que se definen dividiendo la cantidad por una unidad determinada. Por ejemplo, al tabular los valores numéricos de las magnitudes físicas o al etiquetar los ejes de los gráficos, es especialmente conveniente utilizar el cociente de una magnitud física y una unidad de forma que los valores a tabular sean valores numéricos, como en las ecuaciones (1.3) y (1.4).



Equilibrio ácido-base

2.1 Soluciones reguladoras

Una solución amortiguadora (regulada o buffer) se opone a cambios de pH cuando se le añaden ácidos o bases, o cuando se diluye. Una solución reguladora está compúesta por la mezcla de un ácido débil y su base conjugada ó una base débil y su ácido conjugado, en esta mezcla el ácido y su base conjugada deben estar en cantidades comparables (dentro de una proporción de 1:10 ó 10:1) para funcionar eficazmente. Esto quiere decir que para preparar una solución reguladora existen principalmente tres opciones diferentes.

Ejemplo 2.1. Se mezcla un ácido débil y una base fuerte, pero debe cumplir que c(HA) > c(NaOH).

Ejemplo 2.2. Se mezcla un ácido débil y una sal del ácido débil, pero debe cumplir que $c(\text{HA}) \approx c(\text{NaA})$.

Ejemplo 2.3. Por último la opción menos usada es mezclar la sal del ácido débil y un ácido fuerte, pero debe cumplir que c(NaA) > c(HCl).

Table 2.1: Algunos reguladores comunes

Solución reguladora	Rango aproximado de pH
Ácido ftálico/hidrogeno ftalato de potasio	2.2 - 3.8
Ácido acético/acetato de sodio	3.4 - 5.9
Hidrogeno ftalato de potasio/ftalato de potasio	4.0 - 6.2
Dihidrógeno fosfato de potasio/hidrógeno fosfato de potasio	5.8 - 8.0
Ácido bórico/borato de sodio	7.8 - 10.0
Glicina/glicinato de sodio	9.5 - 11.7
Hidrógeno fosfato de potasio/fosfato de potasio	11.0 - 12.0

2.1.1 Capacidad reguladora

La capacidad de un regulador, β , es una medida de la resistencia de la disolución a cambiar de pH, cuando se le añade un ácido o una base fuerte. La capacidad de un regulador se define como [Slyke, 1922]:

$$\beta = \frac{d \ c(b)}{d \ pH} = -\frac{d \ c(a)}{d \ pH}$$

donde c(a) y c(b) es la cantidad de sustancia de ácido fuerte (por ejemplo, $n(\text{HNO}_3)$) y de base fuerte (por ejemplo, n(NaOH)) por litro necesaria para producir un cambio de una unidad de pH. Cuanto mayor es el valor de β , más resistente es el regulador a un cambio de pH.

Para un ácido débil monoprótico la capacidad reguladora será:

$$\beta = \ln{(10)} \left([\mathrm{H_3O}^+] + [\mathrm{HO}^-] + c(\mathrm{HA})_{Total} \times \alpha_0 \times \alpha_1 \right)$$

donde α_0 y α_1 corresponden a la especie ácida y su base conjugada, respectivamente. Para un ácido poliprótico cambia la ecuación a:

$$\beta = \ln{(10)} \left(\left[\mathbf{H}_3 \mathbf{O}^+ \right] + \left[\mathbf{H} \mathbf{O}^- \right] + c (\mathbf{H} \mathbf{A})_{Total} \times \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \left(j-i \right)^2 \alpha_i \times \alpha_j \right)$$

Cross-references

Cross-references make it easier for your readers to find and link to elements in your book.

3.1 Chapters and sub-chapters

There are two steps to cross-reference any heading:

- 1. Label the heading: # Hello world {#nice-label}.
 - Leave the label off if you like the automated heading generated based on your heading title: for example, # Hello world = # Hello world {#hello-world}.
 - To label an un-numbered heading, use: # Hello world {-#nice-label} or {# Hello world .unnumbered}.
- 2. Next, reference the labeled heading anywhere in the text using \@ref(nice-label); for example, please see Chapter 3.
 - If you prefer text as the link instead of a numbered reference use: any text you want can go here.

3.2 Captioned figures and tables

Figures and tables with captions can also be cross-referenced from elsewhere in your book using \@ref(fig:chunk-label) and \@ref(tab:chunk-label), respectively.

See Figure 3.1.

```
par(mar = c(4, 4, .1, .1))
plot(pressure, type = 'b', pch = 19)
```

Don't miss Table 3.1.

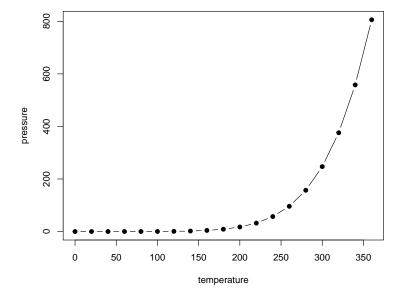


Figure 3.1: Here is a nice figure!

```
knitr::kable(
  head(pressure, 10), caption = 'Here is a nice table!',
  booktabs = TRUE
)
```

Table 3.1: Here is a nice table!

temperature	pressure
0	0.0002
20	0.0012
40	0.0060
60	0.0300
80	0.0900
100	0.2700
120	0.7500
140	1.8500
160	4.2000
180	8.8000

Parts

You can add parts to organize one or more book chapters together. Parts can be inserted at the top of an .Rmd file, before the first-level chapter heading in that same file.

Add a numbered part: # (PART) Act one {-} (followed by # A chapter)

Add an unnumbered part: # (PART*) Act one {-} (followed by # A chapter)

Add an appendix as a special kind of un-numbered part: # (APPENDIX) Other stuff {-} (followed by # A chapter). Chapters in an appendix are prepended with letters instead of numbers.

Footnotes and citations

5.1 Footnotes

Footnotes are put inside the square brackets after a caret ^[]. Like this one ¹.

5.2 Citations

Reference items in your bibliography file(s) using @key.

For example, we are using the **bookdown** package [Xie, 2022] (check out the last code chunk in index.Rmd to see how this citation key was added) in this sample book, which was built on top of R Markdown and **knitr** [Xie, 2015] (this citation was added manually in an external file book.bib). Note that the .bib files need to be listed in the index.Rmd with the YAML bibliography key.

The RStudio Visual Markdown Editor can also make it easier to insert citations: https://rstudio.github.io/visual-markdown-editing/#/citations

¹This is a footnote.

Blocks

6.1 Equations

Here is an equation.

$$f(k) = \binom{n}{k} p^k \left(1 - p\right)^{n-k} \tag{6.1}$$

You may refer to using \@ref(eq:binom), like see Equation (6.1).

6.2 Theorems and proofs

Labeled theorems can be referenced in text using \@ref(thm:tri), for example, check out this smart theorem 6.1.

Teorema 6.1. For a right triangle, if c denotes the length of the hypotenuse and a and b denote the lengths of the **other** two sides, we have

$$a^2 + b^2 = c^2$$

 $Read\ more\ here\ https://bookdown.org/yihui/bookdown/markdown-extensions-by-bookdown.html.$

6.3 Callout blocks

The R Markdown Cookbook provides more help on how to use custom blocks to design your own callouts: https://bookdown.org/yihui/rmarkdown-cookbook/custom-blocks.html

Sharing your book

7.1 Publishing

HTML books can be published online, see: https://bookdown.org/yihui/bookdown/publishing.html

7.2 404 pages

By default, users will be directed to a 404 page if they try to access a webpage that cannot be found. If you'd like to customize your 404 page instead of using the default, you may add either a _404.Rmd or _404.md file to your project root and use code and/or Markdown syntax.

7.3 Metadata for sharing

Bookdown HTML books will provide HTML metadata for social sharing on platforms like Twitter, Facebook, and LinkedIn, using information you provide in the index.Rmd YAML. To setup, set the url for your book and the path to your cover-image file. Your book's title and description are also used.

This gitbook uses the same social sharing data across all chapters in your bookall links shared will look the same.

Specify your book's source repository on GitHub using the edit key under the configuration options in the _output.yml file, which allows users to suggest an edit by linking to a chapter's source file.

Read more about the features of this output format here:

https://pkgs.rstudio.com/bookdown/reference/gitbook.html

Or use:

?bookdown::gitbook

Bibliography

Donald D. Van Slyke. On the measurement of buffer values and on the relationship of buffer value to the dissociation constant of the buffer and the concentration and reaction of the buffer solution. *The Journal of Biological Chemistry*, 52:525, 1922.

Yihui Xie. Dynamic Documents with R and knitr. Chapman and Hall/CRC, Boca Raton, Florida, 2nd edition, 2015. URL http://yihui.org/knitr/. ISBN 978-1498716963.

Yihui Xie. bookdown: Authoring Books and Technical Documents with R Markdown, 2022. URL https://CRAN.R-project.org/package=bookdown. R package version 0.26.