

Química 1º Bachillerato

Enseñando Química con Quimática

J. F. G. H.¹



Multiverse of Madness

¹Space-time Foundation, Eccentric Quantum TimeLord Virtual Academy

Earth planet
Milky Way Galaxy, Laniakea, Known Universe (The Multiverse)

- 1 Conceptos básicos de Química
- 2 Físico-química atómica y molecular
- 3 Termoquímica (1º y 2º Bachillerato)

Moles y masa molar

Moles y masa molar

El número de moles (n) de una sustancia o especie química se calcula dividiendo la masa en gramos (m) entre la masa molar de dicha sustancia. Matemáticamente:

$$n = \frac{m(g)}{MM}$$

Uso: cuando me dan la masa en gramos y puedo calcular o me dan la masa molar de la sustancia.

Uso(II): cuando me dan los moles y la masa molar, puedo calcular los gramos, despejando

$$m(g) = n \cdot MM$$

Abundancia relativa de un elemento

Abundancia relativa y masa molar de un elemento X

Todo elemento de la Tabla Periódica viene en forma de varios isótopos, que tienen ciertas abundancias isotópicas relativas ($A_i(X_i)$). La masa atómica de un elemento que figura en la Tabla Periódica es, en realidad, la suma ponderada de las masas atómicas de los diferentes isótopos de X, que podemos denotar por $m_i(X_i)$, cada uno con una abundancia relativa natural $A_i(X_i)$ en tanto por uno (o por ciento). Entonces, la masa atómica molar de un elemento es

$$m(X) = MM(X) = \sum_i A_i(X_i) m_i(X_i) \quad (1)$$

y donde $A_i(X_i)$ es la abundancia relativa del isótopo X_i , con masa molar $m_i(X_i)$.

Número de Avogadro

Un mol, en el S.I., está relacionado con la constante de Avogadro

$$N_A \quad 6;022 \quad 10^{23} \text{mol}^{-1}:$$

Ecuaciones para el número de partículas y moles

El número N de partículas de una sustancia, se calcula mediante la expresión

$$N = n \quad N_A$$

Uso: Calcular el número de partículas (átomos, moléculas, iones,...).

Uso(II) : Calcular el número de moles si sé N

$$n = \frac{N}{N_A}$$

Masa y partículas

Combinando los casos anteriores, podemos calcular la masa de un determinado número de partículas porque igualando

$$\frac{N}{N_A} = \frac{m(g)}{MM}$$

Por tanto, tendremos que

Masa y número de partículas

Para calcular la masa de un determinado número de partículas, combinando la masa molar y el valor de la constante o número de Avogadro N_A , se usa la expresión:

$$m(g) = \frac{N}{N_A} MM$$

Gases ideales(I)

Para un gas igual o perfecto, las leyes de los gases ideales de Boyle-Mariotte, Gay-Lussac, Charles, Avogadro y combinada (general) o Clapeyron pueden sintetizarse en una simple ecuación de estado denominada ecuación del gas ideal, que tiene la forma siguiente.

Ecuación de estado del gas ideal

Para todo gas ideal o perfecto, se cumple la ecuación

$$PV = nRT$$

donde P es la presión, V es el volumen, n es el número de moles, T es la temperatura absoluta en kelvin y R es la constante de los gases ideales.

Uso: Hallar el volumen conocida la presión, la temperatura T , y los moles n , o bien calcular cualquiera de las 4 variables ($P; V; n; T$), conocidas 3 de ellas.

Gases ideales(II)

Generalmente, P se da en atmósferas (atm), V en litros, y T en kelvin

$$R = 0,082 \text{ atm L K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

En unidades del S.R.: $R = 8,31 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ Comentario: $R = k_B N_A$

Ley de Dalton de las presiones parciales

$$P_i = x_i P_T \quad (2)$$

donde x_i es la fracción molar de la especie i -ésima, P_T es la presión total, dada por la suma de presiones parciales de cada gas:

$$P_T = \sum_i x_i P_i = \sum_{i=1}^N x_i P_i = P_1 + P_2 + \dots + P_N \quad (3)$$

Recuerda

Recuerda: $1\text{atm} = 760\text{mmHg} = 1013\text{mb} = 101300\text{Pa} = 1013\text{hPa}$.

Recuerda(II): $T(\text{K}) = T(\text{C}) + 273$.

Recuerda(III): $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{J K}^{-1}$.

Recuerda(IV): se denominan condiciones normales (c.n.) de presión y temperatura a $P = 1\text{atm}; T = 0\text{C} = 273\text{K}$; se denominan condiciones estándar (c.e.) de presión y temperatura a $P = 1\text{atm}; T = 25\text{C} = 298\text{K}$.

Mnemotecnia: $P_a V_o = R_a T_o$. O también, frases como

Pues Vale, no Recuerdo Todo

Poderes Valiosos (Venusianos) no Requieren Telequinesis
(Teletransportación)

o cualquier otra que produzca vuestra imaginación.

Disoluciones(I)

Las disoluciones son mezclas homogéneas con un soluto y disolvente. La concentración es la medida de cuánto soluto hay en la disolución. Hay varias formas de medir la concentración

Gramos por litro

Si simplemente dividimos la masa en gramos de soluto entre el volumen en litros de disolución, tenemos la concentración de una disolución en g=L (ó g=mL u otras unidades)

$$C(\text{g=L}) = \frac{\text{Masa en gramos de soluto}}{\text{Volumen en litros de disolución}} = \frac{M_s(\text{g})}{V(\text{L})}$$

Disoluciones(II)

Porcentaje en masa y volumen

Si conocemos la masa de soluto y disolvente M_s , M_d , o el volumen de soluto y disolvente V_s , V_d , conocemos la masa total y el volumen total de disolución $m = M_s + M_d$, y $V = V_s + V_d$. Entonces podemos definir la concentración en porcentaje de masa y volumen como sigue:

$$C(\%; m) = \frac{M_s}{m} \cdot 100 = \frac{\text{Masa de soluto}}{\text{Masa de disolución}} \cdot 100$$

y donde la masa de soluto y disolvente está en las mismas unidades, generalmente en gramos en Química.

$$C(\%; V) = \frac{V_s}{V} \cdot 100 = \frac{\text{Volumen de soluto}}{\text{Volumen de disolución}} \cdot 100$$

Disoluciones(III)

Molaridad y molalidad

En Química, es frecuente trabajar con moles, por lo que hay varias formas de dar la concentración con moles. La más frecuente es la molaridad M que mide los moles por litro (partido por litro, L) de disolución $M = \text{mol}=\text{L}$:

$$M = \frac{\text{Moles de soluto}}{\text{Volumen de disolución en litros}} = \frac{n_s}{V_d(\text{L})}$$

La otra medida de concentración molar es la llamada molalidad (no confundir con masa), :

$$m = \frac{\text{Moles de soluto}}{\text{Masa en kg de disolvente}} = \frac{n_s}{M_d(\text{kg})}$$

Disoluciones(IV)

Finalmente, hay otra medida de concentración de disoluciones, llamada fracción molar

Fracción molar

La fracción molar X_i (sin unidades) de una especie química o compuesto/sustancia es igual al número de moles de la sustancia (n_i) entre el número de moles totales:

$$X_i = \frac{n_i}{n_t}$$

Si solamente hay un soluto y un disolvente, las fracciones molares de soluto X_s y disolvente X_d satisfacen las ecuaciones:

$$X_s = \frac{n_s}{n_t}$$

$$X_d = \frac{n_d}{n_t}$$

$$n_t = n_s + n_d$$

$$X_s + X_d = 1$$

Recuerda

¾Cuándo se usan unas formas de concentración y cuándo otras? Depende del contexto y la situación. En industria alimentaria, y otras áreas, se pre ere los tantos por ciento en masa y volumen o el g/L (o g/mL). En Química, es más habitual usar la molaridad y la fracción molar, en menor medida la molalidad.

Recuerda: no confundir concentración con densidad. La densidad mide masa total (no solamente la de soluto) en un volumen

$$d = \frac{m}{V}$$

La densidad se mide en kg m^{-3} o en g cm^{-3} (g c:c:) habitualmente.

Ley de Lavoisier

Ley de Lavoisier

En toda reacción química se conserva la masa y el número de átomos de cada elemento que intervienen en ella. Matemáticamente:

$$\sum_{\text{reactivos}} X M_{\text{reactivos}} = \sum_{\text{productos}} X M_{\text{productos}} \quad \$$$

$$\sum_{i=1}^{X^r} M_i = \sum_{j=1}^{X^s} M_j$$

(4)

$$\sum_{\text{reactivos}} X N(x; \text{reactivos}) = \sum_{\text{productos}} X N(x; \text{productos}) \quad (5)$$

para el número de átomos X de en reactivos y productos (para una ecuación o reacción química balanceada o ajustada, el número de átomos de cada tipo en reactivos y productos es el mismo).

Propiedades coligativas y más allá

Aumento ebulloscópico y descenso crioscópico

El aumento del punto de ebullición y el descenso del punto de fusión o congelación debido a la adición de un soluto se calcula mediante las expresiones:

$$t_e = m K_{eb}$$

donde m es molalidad y K_{eb} es la constante ebulloscópica, mientras que

$$t_c = m K_c$$

donde K_c es la constante crioscópica. En el caso del aumento ebulloscópico, se introduce a veces el llamado factor de van't Ho (por Jacobus Henricus van't Ho). Si un electrolito u otro compuesto se disocia en q iones distintos al disolverse, siendo el grado de disociación del electrolito, entonces el factor de van't Ho será: $i = 1 + (q - 1)\alpha$, y $t_e = i m K_{eb}$.

Propiedades coligativas y más allá(II)

Aumento de la presión de vapor y presión osmótica

El aumento de la presión de vapor y el valor de la presión osmótica debido a la naturaleza de un soluto en una membrana se calcula con las expresiones:

$$P = \chi_s P_0; \quad \pi = MRT$$

Además se definen la pureza P y el rendimiento R de la forma siguiente:

Pureza

$$P = \text{Pureza} = \frac{\text{Cantidad de materia pura}}{\text{Cantidad de materia total}} \cdot 100 \quad (6)$$

Rendimiento

Rendimiento

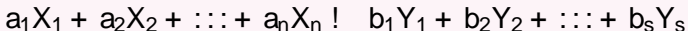
$$R = \text{Rendimiento} = \frac{\text{Cantidad de sustancia real producida}}{\text{Cantidad de sustancia teórica}} \cdot 100 \quad (7)$$

Reacciones químicas(I)

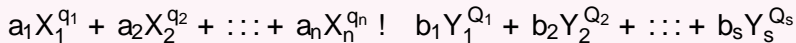
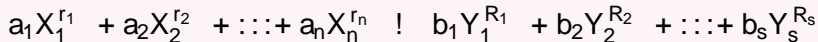
Reacciones químicas y estequiometría

Reacción química: es toda transformación de unas sustancias o especies químicas llamadas REACTIVOS en otras sustancias o especies químicas llamadas PRODUCTOS:

Reactivos Productos



Para una reacción química con cargas



Reacciones químicas(II)

Leyes de conservación de las reacciones químicas

La ley de conservación de la masa establece que

$$\sum_{i=1}^n M(X_i) = \sum_{j=1}^s M(Y_j)$$

$$M(X_1) + M(X_2) + \dots + M(X_n) = M(Y_1) + M(Y_2) + \dots + M(Y_s)$$

Ley de conservación de la carga eléctrica:

$$\sum_{i=1}^n q(X_i) = \sum_{j=1}^s Q(Y_j)$$

$$q(X_1) + q(X_2) + \dots + q(X_n) = Q(Y_1) + Q(Y_2) + \dots + Q(Y_s)$$

$$q_1 + q_2 + \dots + q_n = Q_1 + Q_2 + \dots + Q_s$$

Reacciones químicas(III)

Las etapas de cualquier reacción química son generalmente:

Choques y colisiones entre átomos, moléculas e iones.

Ruptura de los enlaces de los reactivos.

Formación de los enlaces de los productos, en general a través de sustancia intermedia denominada complejo activado o estado de transición.

Finalización de la reacción cuando se agota el reactivo limitante o los choques dejan de ser efectivos o su energía no es suficiente para que la reacción tenga lugar.

Reacciones químicas(IV): Estequiometría

En una reacción química con varios números cuánticos, bajo ciertas simetrías S_i , se conservan ciertas cargas (masa, carga eléctrica, carga de color, ...) con lo que hay igual carga de tipo Q . Toda reacción química puede entenderse con un proceso de transferencia de cierto tipo de carga entre diferentes tipos de sustancias u objetos elementales/compuestos.

La Estequiometría es la parte de la Química que se ocupa del análisis de las reacciones químicas y los cálculos químicos.

En particular, se ocupa de balancear las reacciones químicas y hacer cálculos con reactivos y productos. Se dice que una reacción o ecuación química está balanceada o ajustada cuando el número de átomos o especies de cada tipo, y las cargas eléctricas si no fueran reacciones neutras (sin carga), son iguales en reactivos y productos. El proceso mediante el cual se logra que una reacción química esté ajustada, se llama ajuste o balance de una reacción química (ecuación química).

Los números que preceden a cada compuesto, partícula, o ión en el proceso de ajuste se denominan coeficientes estequiométricos.

Estequiometría(I)

Una reacción química puede verse como cierto tipo de igualdad, o una representación simbólica de un proceso químico real, mediante los símbolos de los elementos, compuestos, y los números que indican cuántos átomos de cada elemento en el compuesto hay, y los coeficientes estequiométricos indicando el número de moléculas o unidades de cada entidad química fundamental que intervienen en la reacción química.

Estequiometría(II)

Además, en una reacción química, se suele especificar también otras informaciones:

El estado físico de cada sustancia, si ha lugar. Por ejemplo $\text{Cu}(s)$ indica cobre sólido, $\text{H}_2\text{O}(l)$ indica agua líquida, $\text{O}_2(g)$ oxígeno gaseoso y $\text{HCl}(aq)$ ó $\text{HCl}(ac)$ indican disolución acuosa.

La energía necesaria para que se produzca la reacción química. Si la energía es absorbida $E > 0$ y se dice que la reacción es endotérmica. Si la energía es cedida o liberada $E < 0$ y la reacción se dice que es exotérmica. La parte de la Química de reacciones que estudia los procesos de energía en las reacciones químicas se llama Termoquímica.

Estequiometría(III)

De nuevo, el procedimiento para igualar el número de átomos de cada elemento en reactivos y productos, se llama ajuste. El ajuste se puede realizar por tanteo, o usando diversos procedimientos algebraicos o numéricos. De los últimos, destaca el método de los coeficientes indeterminados, que no explicaré aquí. Pasos:

Escribir la reacción química.

Analizar los reactivos y productos, contando el número de átomos de cada elemento que interviene en la reacción.

Añadir los coeficientes estequiométricos oportunos, por tanteo, delante de las fórmulas o especies químicas correspondientes para igualar el número de átomos. Suele preferirse multiplicar el resultado final por números de forma que los coeficientes estequiométricos sean números enteros, aunque en ocasiones se puede permitir el dejar coeficientes estequiométricos fraccionarios, no es lo más común esto último.

En casos difíciles, usar métodos numéricos o el procedimiento de los coeficientes indeterminados. Si una reacción no puede ajustarse, es que no es posible en la naturaleza.

Estequiometría(IV)

Observación: para que una reacción química tenga lugar, ésta absorbe libera energía, según el caso. En las reacciones exotérmicas:



y para las reacciones endotérmicas



Una reacción química ajustada o balanceada, que incluya además los estados físicos o de cada reactivo y producto, aporta una información crucial para el científico (químico, biólogo, físico, médico, ...). Esta información puede ser:

Estequiometría(V)

Las fórmulas de los reactivos y productos, por lo que se identifica la naturaleza de la reacción química. Eso incluye tipo de compuesto o elemento o partícula(ion), y su carga eléctrica (en general se trabaja con reacciones químicas neutras, pero son importantes también las reacciones de transferencia de carga eléctrica, o procesos de oxidación-reducción).

Número de átomos de cada elemento y especie química (partícula, ion) que interviene, así como su carga eléctrica.

Número de moles de cada sustancia que intervienen en reactivos y productos.

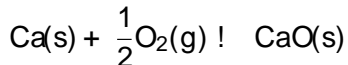
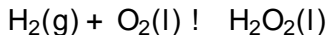
Volumen de reactivo y producto, en el caso de reacciones en las que intervienen gases. En reacciones gaseosas, se cumple la denominada Ley de Avogadro El mismo número de moles de gases diferentes, en las mismas condiciones de presión y temperatura, contienen el mismo número de partículas y tienen el mismo volumen .

Masas de reactivos y productos que intervienen, en virtud de la ley Lavoisier.

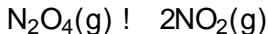
Tipos de reacciones químicas

Hay una cantidad enorme de reacciones químicas posibles. Tipos básicos

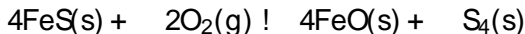
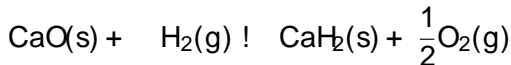
Reacción de síntesis o de formación. Son aquellas reacciones en las que hay solamente una sustancia en los productos. Ejemplos:



Reacción de descomposición o de desintegración o disociación.
Ejemplos:

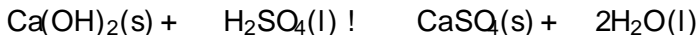


Reacción de desplazamiento. Aquella en la que se produce un cambio, y solo uno, de las partes o iones de reactivos entre sí. Ejemplos:



Tipos de reacciones químicas(II)

Reacción de doble desplazamiento o metátesis Aquella en la que hay dos cambios en las partes de los iones de reactivos entre sí. Ejemp

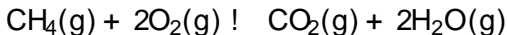
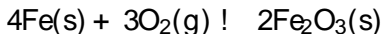
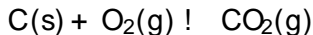


Un caso particular importante de las reacciones de doble desplazamiento son las que se producen por combinación de un ácido (sea hidrácido u oxoácido) con un hidróxido (llamado también base). Estas reacciones son llamadas reacciones ácido-base y son importantes en Química, Física y la vida cotidiana (también en Bioquímica).

Tipos de reacciones químicas(III)

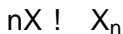
Reacciones de combustión (u oxidación). Son aquellas reacciones que tienen lugar con la reacción de una sustancia con el oxígeno.

Algo + O₂(g) ! Otra cosa. Ejemplos:



La reacción de combustión de un compuesto de carbono e hidrógeno (hidrocarburo), un hidroxcarburo (carbono, hidrógeno y oxígeno), produce generalmente dióxido de carbono y agua en general.

Reacciones de polimerización. Son aquellas reacciones que se forman por la adición o repetición de una unidad fundamental o monómero en una unidad compuesta de varios llamados polímero:



Ejemplos: $2\text{NO}_2 \rightarrow (\text{NO}_2)_2 \rightarrow \text{N}_2\text{O}_4$, $n\text{CH}_2 \rightarrow (\text{CH}_2)_n$.

Contenido

- 1 Conceptos básicos de Química
- 2 Físico-química atómica y molecular
- 3 Termoquímica (1º y 2º Bachillerato)

Hipótesis cuántica de Planck

Todo fotón no tiene una energía arbitraria sino viene dada en paquetes o unidades mínimas denominadas cuantos de energía. Para un fotón simple, se verifica:

$$E = hf = \hbar\omega \quad (8)$$

donde h es la constante de Planck y $\hbar = h/2\pi$ es la constante de Planck racionalizada.

Efecto fotoeléctrico

Ley de Einstein del efecto fotoeléctrico

La frecuencia mínima de un fotón que es capaz de arrancar electrones de un metal, que salen con velocidad v_e , verifica la relación

$$hf = hf_0 + E_c$$

\$

$$hf = hf_0 + \frac{1}{2}m_e v_e^2 \quad (9)$$

donde $W_e = hf_0$ es el trabajo de extracción del metal, m_e es la masa del electrón, y el potencial de frenado se denota como $V_0 = hf_0 - E_c = eV_0$.

Modelo de Bohr(I)

La cuantización del momento angular $L = pr = mvr = nh$, con $n = 1; 2; 3; \dots; \infty$, conlleva el espectro de la fórmula de Balmer

$$E(n_1; n_2) = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (10)$$

y donde $n_1 < n_2$ para transiciones de niveles excitados $E > 0$, y $n_2 < n_1$ para transiciones de desexcitación $E < 0$. R es la constante de Rydberg, que tiene un valor de $13.6 \text{ eV} = 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$, y se puede expresar en términos de magnitudes más fundamentales. La fórmula de Balmer se puede escribir para número de ondas \bar{k} como sigue

$$\bar{k}(n_1; n_2) = \bar{R} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (11)$$

y donde $\bar{R} = R/hc = 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

Modelo de Bohr(II)

Modelo de Bohr

Los niveles de energía o capas, están cuantizados en radios por la siguiente expresión

$$r_n = a_0 n^2 / Z^+ \quad ; \quad n = 1; 2; 3; \dots; \infty \quad (12)$$

y donde $a_0 = 0,53 \text{ \AA} = 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ es el radio de Bohr.

Modelo de Bohr(III)

De todos los modelos atómicos, el primero que usó las ideas cuánticas fue el modelo de Bohr del átomo de hidrógeno. Pero solamente funcionara para los átomos con un electrón hidrogenoides. En dicho modelo, además de usar las ideas cuánticas, y aunque se mantiene la imagen clásica de átomo, puede explicar el espectro del átomo de hidrógeno (sin incluir efectos adicionales mecanocuánticos como el efecto Stark, el desdoblamiento de líneas espectrales debido a un campo magnético, llamado efecto Zeeman, el efecto del espín del electrón sobre el espectro, efecto Zeeman anómalo). Intentando extender el modelo para incluir correcciones relativistas, Sommerfeld introduce las cuantizaciones adiabáticas o acción-ángulo:

Z

$$p_i dq = n_i h \quad (13)$$

que llevaban en general a órbitas elípticas del electrón. Pero la cantidad de evidencias que dejaba sin explicar esta corrección relativista, fue lo que obligó a la introducción del modelo cuántico del átomo y partículas subatómicas.

Modelo mecanocuántico

Usando relaciones cinemáticas relativistas, y la idea subyacente de dualidad de De Broglie propone que toda partícula tiene una longitud de onda asociada

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (14)$$

Para el caso no relativista con masa, el momento $p = mv$ y

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (15)$$

Para el caso relativista con masa, el momento $p = \gamma m v = \gamma m_0 v$, y

$$\lambda = \frac{h}{\gamma m v} = \frac{h}{m_0 v} \frac{1}{\gamma} = \frac{h}{m_0 v} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (16)$$

Modelo mecanocuántico(II)

Longitud de onda de De Broglie

Para fotones , o más generalmente partículas relativistas sin masa (fotones, gluones, gravitones,...) se tiene

$$E = \frac{hc}{\lambda} = hf !$$

$$\lambda_{dB} = \frac{hc}{E} = \frac{h}{p} \quad (17)$$

porque $E = pc$ para el caso de partículas relativistas sin masa. Nótese que en relatividad $E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2$, $E = mc^2$ es la masa en reposo, mientras que $E = \gamma mc^2 = \gamma m c^2$ es la energía total relativista, y la energía cinética relativista será $E_{ca} = mc^2 = (\gamma - 1)mc^2$.

Modelo mecanocuántico(III)

La idea de longitud de onda de De Broglie permite ya introducir el concepto de microscopio con partículas cuánticas. Un microscopio es simplemente resultado de arrojar fotones sobre algo y reconstruir una imagen...Eso mismo puede hacerse con electrones y en general cualquier otra partícula.

Electron microscope

$$e = p \frac{h}{2m_e eV} \quad (18)$$

X-particle microscope

$$x = p \frac{h}{2m_x ZeV} \quad (19)$$

Modelo mecanocuántico(IV)

Electron microscope(II)

$$e = \frac{12,25 \cdot 10^{-10} \text{m}}{p \cdot \sqrt{V}} = \frac{1,225 \text{nm}}{p \cdot \sqrt{V}} \quad (20)$$

X-particle microscope(II)

$$e = \frac{12,25 \cdot 10^{-10} \text{m}}{p \cdot \sqrt{N_X Z_X V}} = \frac{1,225 \text{nm}}{p \cdot \sqrt{N_X Z_X V}} \quad (21)$$

Modelo mecanocuántico(V)

Relativistic electron microscope

$$= \frac{h}{p} = h \sqrt{2m_e eV \left(1 + \frac{eV}{2mc^2} \right)^{-1/2}} \quad (22)$$

Relativistic X-particle microscope

$$= \frac{h}{p} = h \sqrt{2m_X Z_X eV \left(1 + \frac{Z_X eV}{2m_X c^2} \right)^{-1/2}} \quad (23)$$

Modelo mecanocuántico(VI)

El mundo subatómico se describe mediante una teoría llamada Mecánica Cuántica. La Mecánica Cuántica puede ser descrita con bastante precisión en general por la ecuación de Schrödinger:

Ecuación de Schrödinger

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi + V \psi = E \psi$$

y donde ψ es la denominada función de onda, generalmente un número complejo, cuyo módulo, según Born (no confundir con Bohr), $|\psi|^2$, se interpreta como la probabilidad de encontrar a la partícula en una localización determinada en el espacio-tiempo.

Modelo mecanocuántico(VII)

La versión relativista se denomina ecuación de Dirac. Acoplada a un campo electromagnético tiene la expresión

Ecuación de Dirac

$$(i\hbar \gamma^\mu (\partial_\mu + e A_\mu) + mc) \psi = 0 \quad (24)$$

Sus soluciones satisfacen el principio de superposición $\sum c_i \psi_i$, y el

Principio de Heisenberg

$$[A, B] = \frac{1}{2} \hbar [A, B]_i \quad (25)$$

$$[x, p] = \frac{\hbar}{2}; \quad [E, t] = \frac{\hbar}{2} \quad (26)$$

Enlace químico(I): números cuánticos

Número cuántico principal. Toma valores enteros positivos, $n \in \mathbb{Z} = 1; 2; \dots; \infty$. Indica la energía del electrón u orbital.

Orbitalmente, indica la capa donde estamos, espectroscópicamente K; L; M; ...

Número cuántico secundario Toma valores enteros positivos incluyendo al cero, desde 0 hasta $n - 1$. $l = 0; 1; 2; \dots; n - 1$. Indica la forma del orbital, y está relacionado con el momento angular orbital $L^2 = l(l + 1)\hbar^2$. Orbitalmente, indica la subcapa (s,p,d,f,...)

Número cuántico magnético. Toma valores enteros desde $-l$, hasta $+l$, i.e., $m \in [-l; +l]$. Se relaciona con el valor de la proyección del momento angular en una dirección espacial dada, i.e., como $L_z = m_l \hbar$. Orbitalmente, indica la orientación espacial o de energía del orbital

Número cuántico de espín Toma valores, en un electrón, igual a $\pm \frac{1}{2}$, i.e., $s = \pm \frac{1}{2}$, donde se ve que el espín electrónico es bivalorado $s = \pm \frac{1}{2}$. Indica el estado de espín de un electrón (o más generalmente de una partícula cuántica, que estará entre $s = \pm \frac{1}{2}$)

Con guración electrónica

Para realizar una con guración electrónica, hay una serie de reglas que seguir, denominadas principio de Aufbau, diagrama de Möller:

En una capa, caben $2n^2$ electrones, y en una subcapa $(2l+1)$ electrones. Los principios adicionales, además del Aufbau, para una con guración electrónica son: principio de exclusión de Pauli (un electrón no puede tener los 4 números cuánticos iguales), regla de Hund (máxima multiplicidad, típicamente excepciones por estabilidad energética en algunas con guraciones de elementos de transición).

Enlace químico y geometría molecular

El enlace químico es la unión entre átomos para lograr una especie química con menor energía que la que tendrían separadamente. Hay tres tipos generales de enlace: iónico, covalente y metálico.

Las moléculas tienen una geometría molecular que puede estudiarse con diferentes modelos: teoría de la repulsión electrónica de los pares de electrones de la capa de valencia, la teoría de la hibridación, y la teoría de los orbitales moleculares y de forma numérica con la ecuación de Schrödinger o Dirac.

El modelo A-X-E y la TRECVA proporciona un modelo cualitativo para la deducción de la geometría molecular aproximada, en donde se puede deducir la polaridad de la molécula mediante la magnitud

$\mu = \sum_i q_i r_i$, llamada momento dipolar eléctrico, que se suele medir en debyes (D). $1 \text{ D} = 3.34 \times 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$.

Enlaces moleculares

A nivel de enlaces moleculares, circa 2020, existen los orbitales moleculares de tipo σ ; π ; δ , que dependen también de la multiplicidad del enlace covalente.

En general, átomos y moléculas buscan configuraciones de mínima energía y máxima estabilidad.

El octeto electrónico ns^2np^6 es una configuración muy estable, pero existen moléculas y átomos con octeto reducido u ampliado. Por ejemplo: BeCl_2 , SF_6 , He,...

Tipos de enlace y teorías modelo de enlace químico

Enlace iónico. Alto número de coordinación. Tiene una energía reticular que se puede calcular mediante el ciclo de Born-Haber. La energía reticular se puede escribir según la siguiente expresión (de Born-Landé):

$$U_r = \frac{K_C Z_1 Z_2 e^2 N_A M}{d_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right) \quad (27)$$

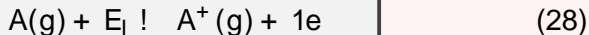
Enlace covalente. Hay enlaces covalentes de red y moleculares.

Enlace metálico. Teoría de la nube electrónica. Teoría de bandas y de energía.

Propiedades periódicas(I)

(Primera) Energía de ionización

La energía (primera) de ionización E_I es la energía que hay que suministrar a un mol de átomos en su estado neutro, fundamental y gaseoso para que pierda un electrón:

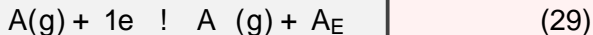


Se pueden definir sucesivas energías de ionización. En un átomo, la energía de ionización aumenta hacia arriba en un grupo y hacia la derecha en un periodo.

Propiedades periódicas(II)

(Primera) A nidad electrónica

La a nidad electrónica A_E es la energía que hay se desprende en un mol de átomos en su estado neutro, fundamental y gaseoso cuando acepta un electrón:



Se pueden de nir sucesivas a nidades electrónicas. En un átomo, a nidad electrónica aumenta hacia arriba en un grupo, y hacia la derecha en un período.

Propiedades periódicas(III)

El radio atómico se puede definir como la mitad de la distancia internuclear entre dos átomos en unión bimolecular.

El radio atómico de un átomo crece hacia la izquierda en un período y hacia abajo en un grupo.

El carácter metálico de un átomo crece hacia la izquierda y hacia abajo en la Tabla Periódica.

El radio iónico y el volumen atómico varían de forma más complicada.

En el caso del radio iónico, sigue aproximadamente la misma tendencia periódica que el radio atómico, y el volumen atómico es más complicado, porque depende de los efectos de apantallamiento de carga por los electrones en los diferentes átomos.

Fuerzas intermoleculares(I)

Hay varios tipos de fuerzas que se establecen entre moléculas:

Fuerzas de Van der Waals. Tiene 3 subtipos: fuerzas de Keesom, fuerzas de Debye y fuerzas de dispersión o de London. Las fuerzas de Keesom y de Debye son de dipolo permanente con potencial $1/r^6$, mientras que las fuerzas de London o de dispersión son más débiles y tienen también similar potencial. Son más débiles que los enlaces covalentes o iónicos. Son fuerzas aditivas y no saturan. No tienen característica direccional, y son fuerzas de corto alcance o residual. Salvo para la fuerza de dipolo-dipolo, no dependen de la temperatura.

Enlaces iónicos.

Enlaces ión-dipolo inducido.

Enlace de hidrógeno (hidrógeno con F, O, N).

Contenido

- 1 Conceptos básicos de Química
- 2 Físico-química atómica y molecular
- 3 Termoquímica (1º y 2º Bachillerato)

Leyes de la Termodinámica

Leyes de la Termodinámica

La ley cero de la Termodinámica señala que, en equilibrio, existe una temperatura entre dos o más sistemas en contacto en una frontera.

La primera ley de la Termodinámica y la Termoquímica señala

$$U = Q + W$$

La segunda ley de la Termodinámica que la entropía de un sistema aislado no puede decrecer con el tiempo.

$$S = \int \frac{dQ}{T}; \quad S_U \geq 0$$

La tercera ley de la Termodinámica indica que el cero absoluto es inalcanzable.

Leyes de la Termodinámica(II)

Matemáticamente, solemos usar el criterio de signos egoísta con las funciones de estado. Una variación de calor positiva es calor absorbido.

Una variación de calor negativa es calor desprendido o cedido. Una variación de trabajo positiva es una contracción del sistema.

Una variación de trabajo negativa es una dilatación del sistema.

Una variación de energía interna positiva, aumenta la energía interna y si es negativa disminuye.

Leyes de la Termodinámica(III)

La entropía es una función de estado que mide el desorden, o más precisamente, el número de configuraciones microscópicas o grados de libertad posibles para un sistema de estado macroscópico.

Boltzmann dedujo en el siglo XIX a partir de la teoría atómico-molecular, que $S = k_B \ln \Omega$, donde Ω es el número de microestados posibles compatibles para un macroestado dado.

Efectivamente, si solamente hubiera UN estado o configuración, la entropía sería cero. No ocurre así en general.

Una manera graciosa de recordar las leyes termodinámicas es mediante la frase metafórica: No puedes ganar, no puedes empatar, no puedes salirte del juego .

Termoquímica(I)

Una reacción es exotérmica si $H_R^0 < 0$, y endotérmica si $H_R^0 > 0$.
El calor de reacción para moles es $Q = n H_R^0$.

Una reacción aumenta el desorden si $S_R^0 > 0$, y lo disminuye si $S_R^0 < 0$. El signo de S_R^0 coincide generalmente con el de la variación de moles gaseosos de una reacción.

La espontaneidad de una reacción se deduce con la energía libre de Gibbs. $G = H - T S$. La temperatura de equilibrio es $T_e = H = S$ (no existe para todas las reacciones). Una reacción es espontánea (exergónica) si $G_R^0 < 0$, y no espontánea (endergónica) si $G_R^0 > 0$.

Entalpías y entropías de reacción según reactivos y productos

$$H_R^0 = \sum_p n_p H_f^0(\text{prod}) - \sum_r n_r H_f^0(\text{reac}) \quad (30)$$

$$S_R^0 = \sum_p n_p S_f^0(\text{prod}) - \sum_r n_r S_f^0(\text{reac}) \quad (31)$$

$$H_R^0 = \sum_p X^p H_e(\text{rotos}) - \sum_r X^r H_e(\text{formados}) \quad (32)$$

$$H_R^0 = \sum_i c_i H_i \quad (\text{Ley de Hess}) \quad (33)$$

Otras definiciones de Termoquímica son las siguientes:

Sistema aislado: aquel sistema que no intercambia ni energía ni materia con el entorno.

Sistema cerrado: aquel sistema que intercambia energía pero no materia con el entorno.

Sistema abierto: aquel sistema que intercambia energía y materia con el entorno.

Termoquímica(IV)

La Termodinámica o termoquímica se ocupa de variables macroscópicas de estado, que pueden ser extensivas (si dependen de la cantidad del tamaño del sistema como masa o el volumen) e intensivas (no dependen del tamaño del sistema como presión, temperatura, o densidad).

Un sistema termodinámico es una parte del Universo que sometemos a estudio.

En él tienen lugar procesos reversibles e irreversibles en general.

La reversibilidad de un proceso está generalmente ligado a la variación de entropía.

Termoquímica(V)

Un sistema evoluciona de acuerdo a la segunda ley de la Termodinámica.

El signo de la variación de entropía coincide con la variación de número de moles gaseosos, o el número de estados accesibles.

La entropía de los estados sólido, líquido o gas crece (disminuye) con los cambios progresivos, y disminuye con los cambios regresivos.

En general, un sistema tiende a desordenarse. Fuera del equilibrio ocurren fenómenos de autoorganización y el sentido del crecimiento de la variación de entropía puede cambiar, pero en equilibrio evoluciona de forma que la entropía alcanza un máximo (MaxEnt).

El principio de máxima entropía es análogo al de mínima acción y mínima energía en otros sistemas clásicos o cuánticos.

Termoquímica(VI)

De acuerdo a la teoría cinético-molecular la temperatura es una medida de la agitación de las moléculas o átomos(partículas) constituyentes. Vía la ecuación de Boltzmann

$$\frac{1}{2}m\overline{v^2} = \frac{3}{2}k_B T$$

La presión es una medida del número de impactos o choques de las partículas con el recipiente o frontera que contiene. Un gas o una sustancia en general puede tener ecuaciones de estado, que es una relación entre magnitudes termodinámicas. Para el gas ideal

$$pV = nRT = Nk_B T$$

pero hay otras ecuaciones de estado posibles. Por ejemplo, la ecuación para los gases reales o de Van der Waals, la ecuación del gas de Chaplygin (y sus generalizaciones) y otras varias. La ecuación de Van der Waals es

$$p + \frac{a^0}{v^2} - \frac{b^0}{v} = k_B T$$

Termoquímica(VII)

donde:

p es la presión del fluido en atmósferas.

v es el volumen molar de las partículas, L mol^{-1} .

k_B es la constante de Boltzmann.

T es la temperatura absoluta.

a^0 es un término que involucra la atracción entre partículas.

b^0 es un término que denota el volumen medio excluido por cada partícula.

Si se introducen el número de Avogadro, N_A , el número de moles, n , y el número total de partículas, N , entonces se reescribe como

$$p + \frac{n^2 a}{V^2} (V - nb) = nRT$$

y donde ahora

Termoquímica(VIII)

p es la presión del fluido.

V es el volumen total del recipiente.

a mide la atracción entre partículas $\propto N_A^2 a^0$.

b es el volumen disponible de un mol $\propto N_A b^0$.

n es el número de moles.

T es la temperatura absoluta en kelvin.

R es la constante de los gases ideales $\propto N_A k_B$.

Generalmente una ecuación de estado liga presión con densidad y/o temperatura. Para el gas de Chaplygin normal

$$p = p(\rho) = \frac{A}{\rho}$$

y para los gases de Chaplygin generalizados se puede tener por ejemplo

$$p = p(\rho) = \frac{A}{\rho} + B \rho^m + C \ln \rho + D$$

Nótese que el gas ideal en función de la densidad, supuesta la temperatura constante, tiene una ecuación de estado $p(\rho) = K$.

Termoquímica(IXI)

Se puede calcular la temperatura de equilibrio que alcanzan 2 ó más cuerpos en contacto mediante el principio general:

$$Q_{\text{abs}} + Q_{\text{ced}} = 0$$

Los calores absorbidos y cedidos pueden ser:

Calor por cambio de temperatura $Q = C \Delta T = mc_e \Delta T$.

Calor por cambio de estado o transición de fase $Q = mL$.

y donde C es la capacidad calorífica, c_e es el calor específico ($C = mc_e$) y L es el calor latente por cambio de estado.

Ciclo de Carnot(I)

Existen otras funciones termodinámicas interesantes para el científico. Quizás, una de las más relevantes es la energía libre de Helmholtz $F = U - TS$ ($F = U - T S$). Además, desde el punto de vista de la segunda ley de la Termodinámica, el trabajo útil no es igual nunca al trabajo total. Para un sistema cíclico, que funciona entre dos focos térmicos a diferentes temperaturas, Carnot demostró que el rendimiento es igual a

$$\eta = \frac{W_u}{W_t} = \frac{Q_2}{Q_1} = 1 - \frac{T_c}{T_h} \quad (34)$$

y donde $T_c = T_1$ es la temperatura fría, $T_h = T_2$ es la temperatura caliente ($T_1 < T_2$).

Ciclo de Carnot(II)

Así, el rendimiento de un ciclo de Carnot nunca puede ser igual al 100% (segundo principio) dado que la temperatura es siempre positiva y nunca igual al cero absoluto (tercer principio de la Termodinámica). Un ciclo de Carnot funcionando en sentido inverso es un frigorífico (cooler, refrigerator) o también puede ser una bomba de calor (heat pump). Para estos sistemas “invertidos” respecto al ciclo de Carnot usual se suele definir una magnitud llamada coeficiente de funcionamiento (Coefficient Of Performance, COP; en el caso del heat pump también se le llama coefficient of amplification, COA):

$$COP = \frac{Q}{W} \quad (35)$$

$$COP(R) = \frac{Q_L}{W} \quad (36)$$

Ciclo de Carnot(III)

$$COP(HP) = \frac{Q_H}{W} = 1 + \frac{Q_L}{W} = 1 + COP(R) \quad (37)$$

Ambos coeficientes pueden ser mayores que uno. En términos de la temperatura, estos coeficientes valen:

$$COP(R) = \frac{T_L}{T_H - T_L} = \frac{1}{\frac{T_H}{T_L} - 1} \quad (38)$$

$$COP(HP) = \frac{T_H}{T_H - T_L} = \frac{1}{1 - \frac{T_L}{T_H}} \quad (39)$$

Perpetuum mobile o móviles perpétuos

Los móviles perpetuos infringen las leyes termodinámicas generales. Tipos:

Móvil perpetuo de primera especie. Máquina hipotética que produciría trabajo sin suministro de energía externa. Violaría la primera ley.

Móvil perpetuo de segunda especie. Máquina hipotética que (espontáneamente) transforma todo el calor íntegramente en trabajo. Violaría la segunda ley.

Móvil perpetuo de tercera especie. Máquina hipotética que no tendría fricción ni ninguna fuerza disipativa. Mantendría el movimiento debido solamente a su inercia. No está relacionado a priori con el tercer principio o su violación.

Móvil perpetuo de cuarta especie. El único posible (en principio). Aprovecharía los sutiles efectos mecanocuánticos como el efecto Casimir, la polarización del vacío, la inversión de población de un láser (máser, gráser, . . .), o la energía propia del vacío. También podría usar los cristales de tiempo o alguna de sus variantes((cuasi)(poli)cristales de espacio-tiempo o estructuras asociadas a la ruptura espontánea de la simetría de inversión temporal).

