

Química Inorgánica

Maestra: Martha Eugenia Ortiz Guerra

Grupo 1.1 P

Juan Gonzalo Castañeda López	171P0539
Ilse Priscila Martínez Peña	171P0374
Irvin Damián Rangel Puente	171P0551
Reynaldo Campos Castro	171P0364
Jimena Ramírez Alvarado	171P0601
Carlos Gerardo Álvarez González	171P0537

INDICE

Tema 1 – Teoría cuántica estructura atómica y periodicidad

1.1 Base experimental de la teoría cuántica	1
1.2 Teoría cuántica y configuración electrónica	2
1.3 Características de la clasificación periódica moderna de los elementos.....	4
1.4 Clasificación de los metales de acuerdo a su distribución en la corteza terrestre.....	6

Tema 6 – Equilibrio químico

6.1 Concepto de equilibrio químico y ley de acción de masas.....	8
6.2 Equilibrio acido-base en sistemas acuosos	10
Bibliografía.....	12

Tema 1 – Teoría cuántica estructura atómica y periodicidad

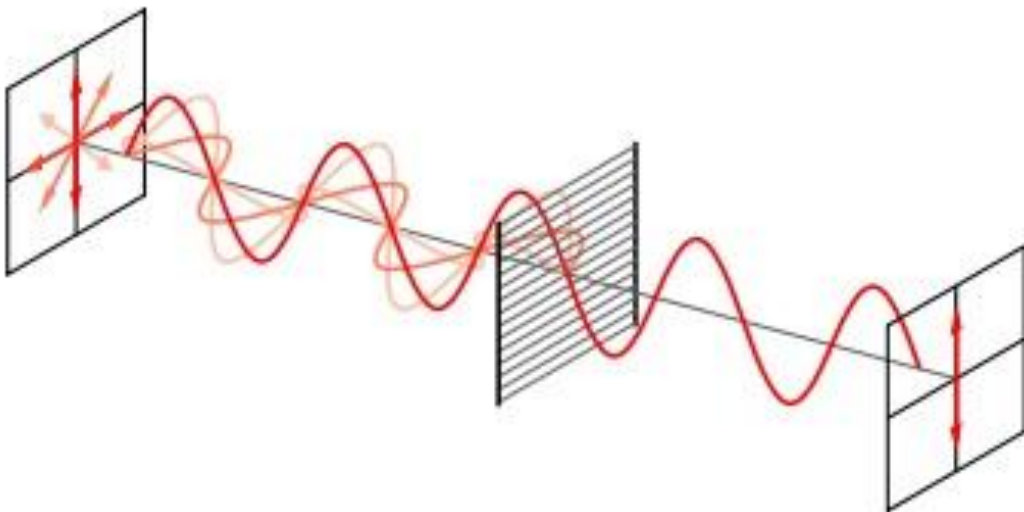
1.1 Base experimental de la teoría cuántica

Es una teoría física basada en la utilización del concepto de unidad cuántica para describir las propiedades dinámicas de las partículas subatómicas y las interacciones entre la materia y la radiación.

Las bases de la teoría fueron por el físico alemán Max Planck (Imagen 27), que en 1900 postulo que la materia solo puede emitir o absorber energía en pequeñas unidades discretas llamadas cuantos. La teoría cuántica básicamente nos dice que la luz no llega de una manera continua, sino que está compuesta por pequeños paquetes de energía, a los que llamamos cuantos. Estos cuantos de energía se llaman fotones. Los fotones son las partículas “fundamentales” de la luz, así como los electrones son las partículas fundamentales de la materia, esta analogía es la que sirvió para realizar el descubrimiento del carácter cuántico de la luz.

Por esta misma analogía, años después, Broglie desarrollo la teoría que formula que la materia también tiene un carácter ondulatorio. La carga eléctrica y la energía tiene una estructura granular (está formada por cuantos), al igual que la materia.

También existe el principio de incertidumbre, formulado por el físico alemán Werner Heisenberg en 1927, y que afirma que no es posible especificar con exactitud simultáneamente la posición y el momento.



1.2 Teoría cuántica y configuración electrónica

Teoría Cuántica

La química cuántica es una rama de la química teórica en donde se aplica la mecánica cuántica y la teoría cuántica de campos.

La química cuántica describe matemáticamente el comportamiento fundamental de la materia a escala molecular. Una aplicación de la química cuántica es el estudio del comportamiento de átomos y moléculas, en cuanto a sus propiedades ópticas, eléctricas, magnéticas y mecánicas, y también su reactividad química, sus propiedades redox, etc., pero también se estudian materiales, tanto sólidos extendidos como superficies.

El estudio de química cuántica tiene una fuerte y activa relación con algunos campos científicos como lo son la física molecular, física atómica y fisicoquímica, y aportaciones han sido hechas tanto por físicos como por químicos. Frecuentemente se considera como primer cálculo de química cuántica el llevado a cabo por los científicos alemanes Walter Heitler y Fritz London (aunque a Heitler y a London se les suele considerar físicos). El método de Heitler y London fue perfeccionado por los químicos americanos John C. Slater y Linus Pauling, para convertirse en la teoría del enlace de valencia (o Heitler-London-Slater-Pauling (HLSP)). En este método, se presta atención particularmente a las interacciones entre pares de átomos, y por tanto se relaciona mucho con los esquemas clásicos de enlaces entre átomos.

Friedrich Hund y Robert S. Mulliken desarrollaron un método alternativo, la teoría de los orbitales moleculares, en que los electrones se describían por funciones matemáticas deslocalizadas por toda la molécula. El método de Hund-Mulliken (o de orbitales moleculares) es menos intuitivo para los químicos, pero, al haberse comprobado que es más potente a la hora de predecir propiedades que el método de enlace de valencia, es virtualmente el único usado en los últimos años.

Configuración Electrónica

En química, la configuración electrónica es la manera en la cual los electrones se estructuran o se modifican en un átomo, molécula o en otra estructura físico-química, de acuerdo con el modelo de capas electrónico, en el cual las funciones de ondas del sistema se expresa como un producto de orbitales anti simetrizadas.

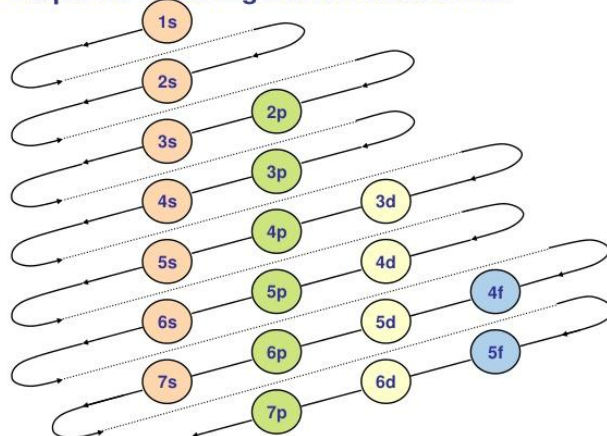
Cualquier conjunto de electrones en un mismo estado cuántico deben cumplir el principio de exclusión de Pauli al ser partículas idénticas. Por ser fermiones (partículas de espín semientero) el principio de exclusión de Pauli nos dice que esto es función de onda total (conjunto de electrones) debe ser antisimétrica.³ Por lo tanto, en el momento en que un estado cuántico es ocupado por un electrón, el siguiente electrón debe ocupar un estado cuántico diferente.

En los átomos, los estados estacionarios de la función de onda de un electrón en una aproximación no relativista (los estados que son función propia de la ecuación de Schrödinger en donde es el hamiltoniano mono electrónico correspondiente; para el caso general hay que recurrir a la ecuación de Dirac de la mecánica cuántica de campos) se denominan orbitales atómicos, por analogía con la imagen clásica de los electrones orbitando alrededor del núcleo.

Estos estados, en su expresión más básica, se pueden describir mediante cuatro números cuánticos: n , l , m y m_s , y, en resumen, el principio de exclusión de Pauli implica que no puede haber dos electrones en un mismo átomo con los cuatro valores de los números cuánticos iguales.

De acuerdo con este modelo, los electrones pueden pasar de un nivel de energía orbital a otro ya sea emitiendo o absorbiendo un cuanto de energía, en forma de fotón. Debido al principio de exclusión de Pauli, no más de dos electrones pueden ocupar el mismo orbital y, por tanto, la transición se produce a un orbital en el cual hay una vacante.

Esquema de configuración electrónica



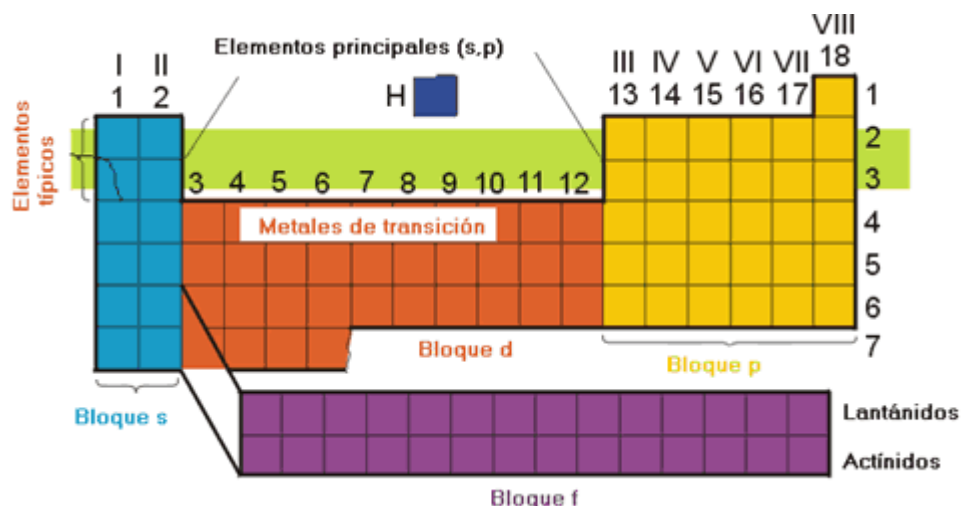
1.3 Características de la clasificación periódica moderna de los elementos.

Fue diseñado por el químico alemán J. Wener, en base a la ley de Moseley y la distribución electrónica de los elementos. Además tomo como referencia la Tabla de Mendeleev.

DESCRIPCION GENERAL:

1. Los 109 elementos reconocidos por la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC) están ordenados según el numero atomico creciente, en 7 periodos y 16 grupos (8 grupos A y 8 grupos B). Siendo el primer elemento Hidrogeno ($Z = 1$) y el último reconocido hasta el momento meitnerio ($Z = 109$); pero se tienen sintetizados hasta el elemento 118.

2. Periodo, es el ordenamiento de los elementos en línea horizontal. Estos elementos difieren en propiedades, pero tienen la misma cantidad de niveles en su estructura atómica



- Cada periodo (excepto el primero) comienza con un metal alcalino y termina con un gas noble.
- El séptimo periodo esta incompleto.
- El sexto

periodo es el que posee mayor cantidad de elementos (es el periodo mas largo)

3. Grupo o Familia, Es el ordenamiento de los elementos en columna. Estos elementos presentan similar disposición de sus electrones externos; de allí que forman familias de elementos con propiedades químicas similares.

Grupos “A”

Están formados por los elementos representativos donde los electrones externos o electrones de valencia están en orbitales “s” y/o “p”; por lo tanto sus propiedades dependen de estos orbitales.

Las propiedades de los elementos representativos dentro del grupo o familia varían de manera muy regular, a ello se debe el nombre de elemento representativo.

Grupos “B”

Están formados por elementos de transición, en cuyos átomos el electrón de mayor energía relativa está en orbitales “d” o “f”; y sus electrones de valencia se encuentran en orbitales “s” (del último nivel) y/o orbitales “d” o “f”; por lo tanto sus propiedades químicas dependen de estos orbitales.

Se denominan elementos de transición, porque se consideran como tránsito entre elementos metálicos de alta reactividad que forman generalmente bases fuertes (IA y IIA) y los elementos de menor carácter metálico que poseen más acentuado su tendencia a formar ácidos (IIIA, IVA, ... VIIA).

El grupo VIIIB abarca tres columnas (familia del Fe, Co y Ni). Los elementos del grupo IB (Cu, Ag, Au), así como también los elementos del grupo VIB (Cr y Mo) no cumplen la distribución electrónica, como ya se analizará oportunamente.

Los elementos del mismo grupo generalmente difieren en sus propiedades. Los elementos de transición interna (tierras raras), poseen electrones de mayor energía relativa en orbitales “f” y pertenecen al grupo IIIB; a estos se les denomina lantánidos y actínidos, cuya abundancia en la naturaleza es muy escasa y muchas veces solo se encuentran en forma de trazas combinados con otros elementos, razón por lo cual se llama “tierras raras”.

Lantánidos (lantanoideos): comienza con lantano ($Z=57$) y termina en lutecio ($Z=71$), poseen propiedades semejantes al lantano.

Actínidos (actinoides): comienza con el actinio ($Z=87$) y termina con lawrencio ($Z=103$), poseen propiedades semejantes al actinio

1.4 Clasificación de los metales de acuerdo a su distribución en la corteza terrestre.

Cada metal se diferencia de otro por su estructura y propiedades, pero existen ciertos indicios que permiten agruparlos. En primer lugar, todos los metales pueden dividirse en dos grandes grupos: metales negros y metales de color.

Metales negros

Este grupo se caracteriza por un color gris oscuro, gran densidad, exceptuando a los metales alcalinos – ferreos, alta temperatura de fusión, dureza relativamente elevada y en muchos casos poseen polimorfismo. El metal más característico de este grupo es el hierro.

Metales férreos

Hierro, cobalto, níquel (llamados ferromagnéticos) y el manganeso, cuyas propiedades se aproximan a las de aquellos. El cobalto, el níquel y el manganeso se emplean frecuentemente como elementos de adición a las aleaciones de hierro y como base para las correspondientes aleaciones, de propiedades parecidas a los aceros de aleación.

Metales refractarios

La temperatura de fusión de estos metales es superior que la del hierro, es decir, superior a 1539 °C. se utilizan como elementos de adición a los aceros de aleación y como base para las correspondientes aleaciones.

Metales uránicos

Actínidos, que se utilizan principalmente en aleaciones para la energía atómica.

Metales tierras raras

Se incluyen en esta categoría al lantano, cerio, neodimio, praseodimio y otros agrupados bajo la denominación de lantánidos, y el itrio y el escandio, semejantes a los primeros por sus propiedades.

Estos metales poseen propiedades químicas muy próximas, pero sus propiedades físicas son bastante distintas (temperaturas de fusión y otras). Se utilizan como aditivos a las aleaciones de otros elementos. En condiciones naturales se encuentran juntos y, debido a las dificultades que hay para separarlos en elementos aislados, se utilizan generalmente como aleación mixta, llamada “misschmetall”, que contiene entre 40 - 45 % de Ce y un 45 -50% de todos los demás elementos de tierras raras. Como aleaciones mixtas deben considerarse también el ferrocerio (aleación de cerio y hierro con otras tierras raras), el didimio y otras. Los metales alcalinotérreos, en estado metálico libre no se utilizan, a excepción de algunos casos especiales.

Metales de color

Suelen tener una coloración roja, amarilla o blanca característica. Poseen gran plasticidad, poca dureza, temperatura de fusión relativamente baja y en ellos es característica la ausencia de polimorfismo. El metal más representativo de este grupo es el cobre.

Metales ligeros

Caracterizados por una baja densidad, entre ellos se encuentran el Berilio, magnesio y aluminio.

Metales nobles

Los metales de esta categoría poseen gran resistencia a la corrosión y en ella se agrupan metales como la plata, el oro y metales del grupo del platino (platino, paladio, iridio, rodio, osmio, rutenio). A ellos puede agregarse el semidoble cobre.

Metales fácilmente fundibles

En esta categoría se encuentran el zinc, cadmio, mercurio, estaño, plomo, bismuto, talio, antimonio y los elementos con propiedades metálicas debilitadas como el galio y el germanio.

Metales Ligeros														No metales													
IA		IIA																									
Metales de transición																											
H																	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	He					
Li	Be															B	C	N	O	F	Ne						
Na	Mg	IIIB	IVB	VB	VB	VIIB	VIIB				IB	IIB	Al	Si	P	S	Cl	Ar									
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr										
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe										
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn										
Fr	Ra	Lr	Ku	Hn																							
Serie de los lantánidos																											
Serie de los actínidos																											
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb														
Ac	Th	Pa	u	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Fm	Md	No	No														

Tema 6 – Equilibrio químico

6.1 Concepto de equilibrio químico y ley de acción de masas.

Concepto de equilibrio.

$$K_{eq} \equiv e^{-\Delta G^0/k_B T}$$

El que las actividades químicas o las concentraciones de los reactivos y los productos no tienen ningún cambio neto en el tiempo. Normalmente, este sería el estado que se produce cuando una reacción reversible evoluciona hacia adelante en la misma proporción que su reacción inversa. La velocidad de reacción de las reacciones directa e inversa por lo general no son cero, pero, si ambas son iguales, no hay cambios netos en cualquiera de las concentraciones de los reactivos o productos. Este proceso se denomina equilibrio dinámico.

Ley de acción de masas.

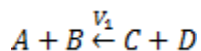
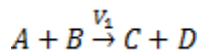
$K_{eq} \equiv e^{-\Delta G^0/k_B T}$ La ley de masas o ley de acción de masas establece que para una reacción química reversible en equilibrio a una temperatura constante, una relación determinada de concentraciones de reactivos y productos tiene un valor constante. La ley fue enunciada en 1864 por los científicos noruegos Cato Maximilian Guldberg y Peter Waage, y debe su nombre al concepto de masa activa, lo que posteriormente se conoció como actividad.

Establece que: La velocidad de una reacción química es directamente proporcional a la concentración de los productos reaccionantes.

Ejemplo:

La reacción es: $A + B \rightleftharpoons C + D$

Deberán considerarse dos velocidades:



Formulación matemática:

$$V_1 = K_1 [A] \cdot [B]$$

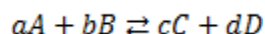
$$V_2 = K_2 [C] \cdot [D]$$

Dónde:

K_1 y K_2 son las constantes de proporcionalidad, que dependen de diversos factores como temperatura, naturaleza de las sustancias.

Constante de equilibrio

Para la reacción general



La termodinámica conduce a la ley del equilibrio químico general:

$$K = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

El numerador es el producto de las concentraciones de los productos en equilibrio, cada una elevada a una potencia igual a su coeficiente estequiométrico en la ecuación química para la reacción.

El denominador es el producto de las concentraciones en equilibrio de los reaccionantes, cada una elevada a una potencia igual a su coeficiente estequiométrico.

6.2 Equilibrio ácido-base en sistemas acuosos

Equilibrio ácido-base en sistemas acuosos

De acuerdo con la teoría clásica de la ionización electrolítica desarrollada por Arrhenius, los electrolitos disueltos en agua, se disocian directamente en partículas cargadas (positivas y negativas) llamadas iones. Para Química Analítica, son de gran interés aquellos electrolitos cuyos iones provocan que la disolución sea ácida ó básica. De acuerdo con la misma teoría, los iones que dan origen al comportamiento ácido son los protones y los iones hidróxido provocan el comportamiento alcalino. Por lo tanto, ácidos son los electrolitos que en disolución acuosa liberan iones hidrógeno, y bases son los que liberan iones hidróxido. El equilibrio ácido - base se puede representar por medio de las ecuaciones siguientes:

Ácido \rightleftharpoons anión + H^+

base \rightleftharpoons catión + OH^-

Esta teoría clásica explica satisfactoriamente muchos de los hechos observados para los equilibrios ácido - base en disolución acuosa. Sin embargo, en disolución no acuosa, se observaron algunos fenómenos no explicados por esta teoría. Un tratamiento correcto de los equilibrios ácido - base en solución acuosa y no acuosa fue dado por Brönsted e independientemente por Lowry en 1923.

Teoría de Brönsted y Lowry

Acido: especie química que cede un protón y genera una base conjugada.

$HA \rightleftharpoons H^+ + A^-$

base ácido conjugada

Base: especie química que acepta un protón y genera un ácido conjugado. $B + H^+ \rightleftharpoons BH^+$
base ácido conjugado Un par ácido base conjugado consiste en dos especies relacionadas entre sí por la donación y aceptación de un simple ion hidrógeno: HA / A^- y B / BH^+ . De la definición anterior se deduce que un ácido posee un H^+ más que su base conjugada. En consecuencia, un ácido puede ser un catión, una molécula ó un anión, ocurriendo lo mismo para las bases.

Ácido molecular: HCl , HNO_3 , H_2SO_4 , CH_3COOH , H_2O

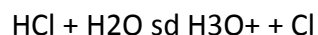
Ácido aniónico: HSO_4^- , $H_2PO_4^-$, HSO_3^- Ácido catiónico: NH_4^+ , H_3O^+ , $Al(H_2O)_6^{3+}$

Base molecular: NH_3 , CH_3NH_2 , H_2O

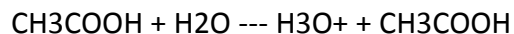
Base aniónica: HPO_2^- , HCO_3^- , SO_3^{2-}

Base catiónica: $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_3^+$

El comportamiento de una especie química como un ácido se define en gran medida por el disolvente en el que se disuelve. Cuando un ácido se disuelve en agua y se ioniza completamente se lo denomina ácido fuerte:



Por el contrario, cuando un ácido se disuelve en agua y se ioniza parcialmente se lo denomina ácido débil:



Análogamente, cuando una base se disuelve en agua y se disocia completamente se la denomina base fuerte:



mientras que si se ioniza parcialmente se la denomina base débil:



Es importante resaltar la diferencia entre los conceptos concentrado – diluido y los conceptos fuerte – débil, los primeros se refieren a la cantidad de soluto disuelto en la disolución, en general, expresado en número de moles de ácido o base presentes en un litro de disolución; los segundos se refieren al poder dador o aceptor de protones del ácido o la base con respecto al disolvente.

Bibliografía

➤ Estructura Electrónica y Elementos Químicos - Universidad de Alcalá

Guliáev, A. P. Metalografía. Tomo I. Editorial Mir Moscú.

Guliáev, A. P. Metalografía. Tomo II. Editorial Mir Moscú.

<https://www.ecured.cu>

➤ <http://unidad1111111111.blogspot.mx/2013/06/21-caracteristicas-de-la-clasificacion.html>

➤ http://es.wikipedia.org/wiki/Qu%C3%ADmica_cu%C3%A1ntica

➤ http://es.wikipedia.org/wiki/Configuraci%C3%B3n_electr%C3%B3nica

➤ <http://www.mitecnologico.com/bioquimica/Main/TeoriaCuanticaYConfiguracionElectronica>