

$$\Delta U = U_{\text{productos}} - U_{\text{reactivos}}$$

$$U = U_{\text{trasl}} + U_{\text{rot}} + U_{\text{vib}} + U_{\text{electrónica}} + U_n$$

ΔH

cantidad de calor absorbido o producido en una reacción. ΔU + la cantidad de trabajo hecho en el curso de la expansión o contracción, ΔV , cuando $p = \text{constante}$.

$$\Delta H = \Delta U + P\Delta V.$$

ΔS

La entropía (S) a una temperatura dada está determinada por el número y espaciado de niveles de energía (vibracional, rotacional, translacional y electrónicos, etc) disponibles y por la accesibilidad para alcanzarlos (Grados de Libertad).

En general, las **más distintas formas de distribución** de la molécula en estos niveles, **la más alta entropía** (el mayor número de grados de libertad).

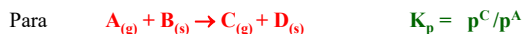
Si los niveles están muy separados para determinada condición, el nivel basal tendrá la mayor ocupación y no contribuirá a la entropía,

ΔG Criterio de espontaneidad

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K \quad K \text{ constante de equilibrio}$$

$$\ln K = -\Delta G^\circ / RT \quad \log K = -0.000175 \Delta G^\circ$$

$p_c > p_A$	$p_c < p_A$	$p_c = p_A$
$K > 1$	$K < 1$	$K = 1$
$\text{Log}K +$	$\text{Log}K -$	$\text{Log}K = 0$
$\Delta G^\circ -$	$\Delta G^\circ +$	$\Delta G^\circ = 0$



$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S$$

condiciones estándar:

Para fines prácticos 1 atm

(1 atm $(1,01325 \times 10^5 \text{ Pa}) \approx 10^5 \text{ Pa}$)

273 K (0°C) y actividades = 1 ($a = p/p^\circ$ para A, B, C y D)

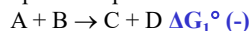
$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ$$

Cuidado con:

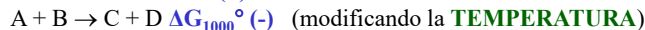
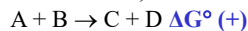
a) ΔG° es **NEGATIVO**, • La reacción puede no proceder por **CINÉTICA**



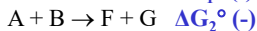
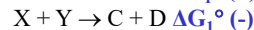
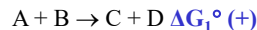
• puede no proceder por otra reacción alterna más favorecida energéticamente



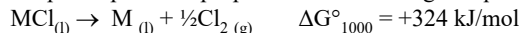
b) ΔG° es **POSITIVO**, • la reacción puede proceder bajo condiciones diferentes



• puede proceder partiendo de diferentes reactivos o puede conducir a dif. productos (**reacción alterna**)



• La reacción puede proceder proporcionando la energía requerida electrolíticamente



al aplicar **fem** requerida procederá por electrolisis

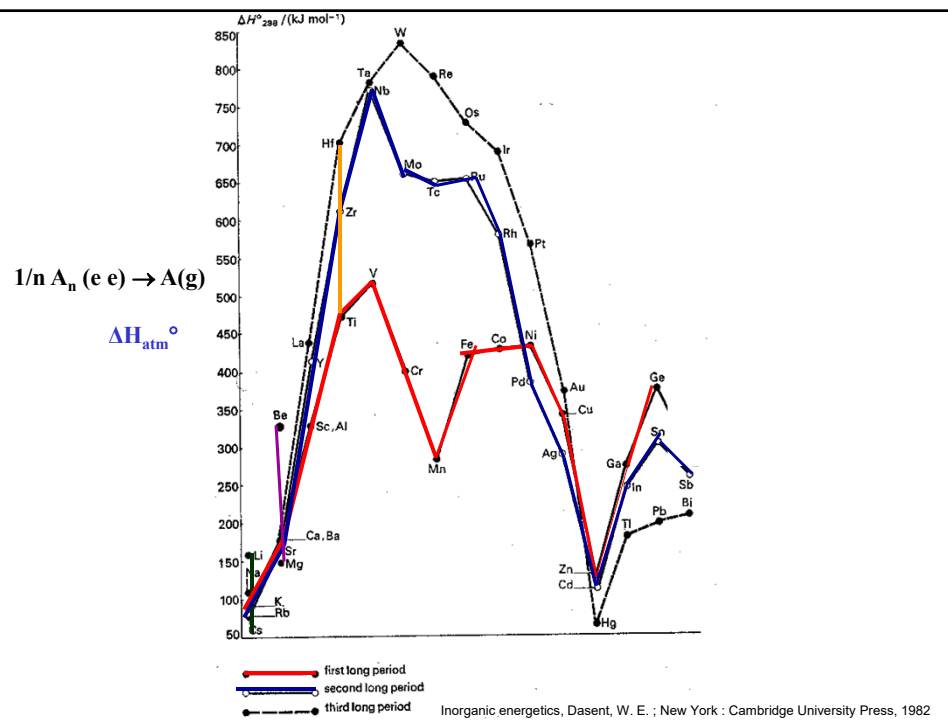
- Temperatura
- Cat

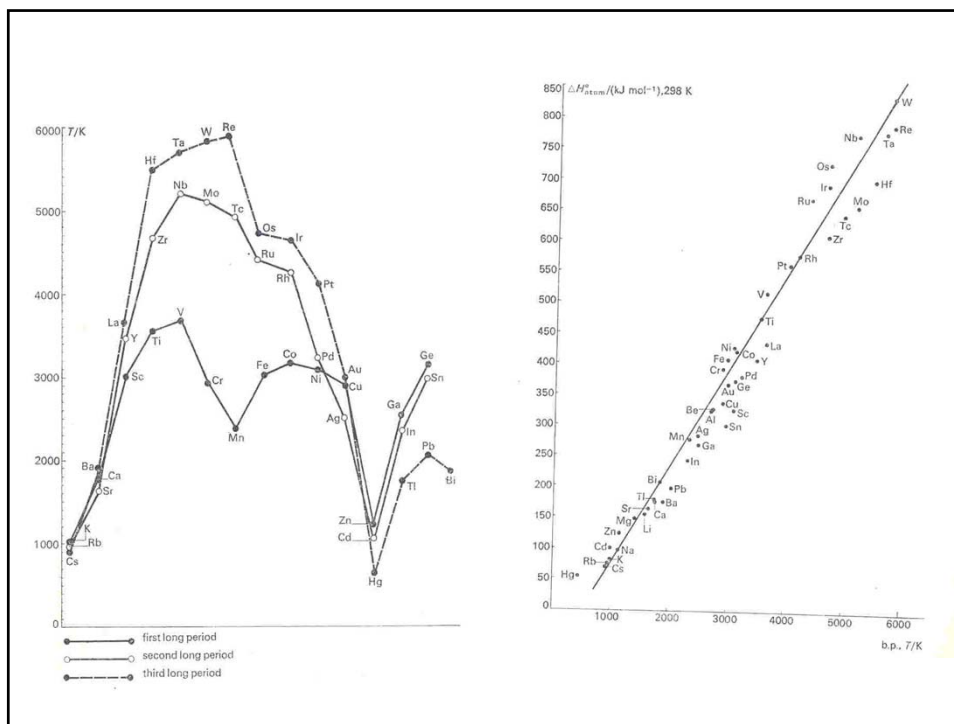
Ley de Hess: El cambio de entalpía de una reacción química es el mismo independientemente de la ruta escogida para la reacción, es decir que son **aditivos** (siempre y cuando se realicen en las mismas condiciones). Por lo tanto puedo escoger cualquier ruta de síntesis para conocer los valores **termodinámicos** asociados a ella (ciclos termodinámicos).

Table 10 Heats of Atomization at 298 K from Elements in Their Standard States, $\Delta H_{298}^\circ / (\text{kJ mol}^{-1})$

			H																
			213																
Li	Be	B														C	N	O	F
161	326	565														715	473	249	79
Na	Mg	Al														Si	P	S	Cl
108	149	324														452	315	278	121
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br			
90	177	326	473	515	397	281	416	425	430	339	126	272	372	287	207	112			
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I			
82	164	410	611	774	659	649	669	577	381	286	111	244	301	259	192	107			
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At			
78	178	435	703	781	837	791	723	690	566	368	61	180	197	207	145	92			
	Ra		Th		U														
	130		571		523														

Inorganic energetics, Dasent, W. E.; New York : Cambridge University Press, 1982





r atm ←

Group	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Period 1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	* 71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	** 103 Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo
			* 57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb		
			** 89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No		

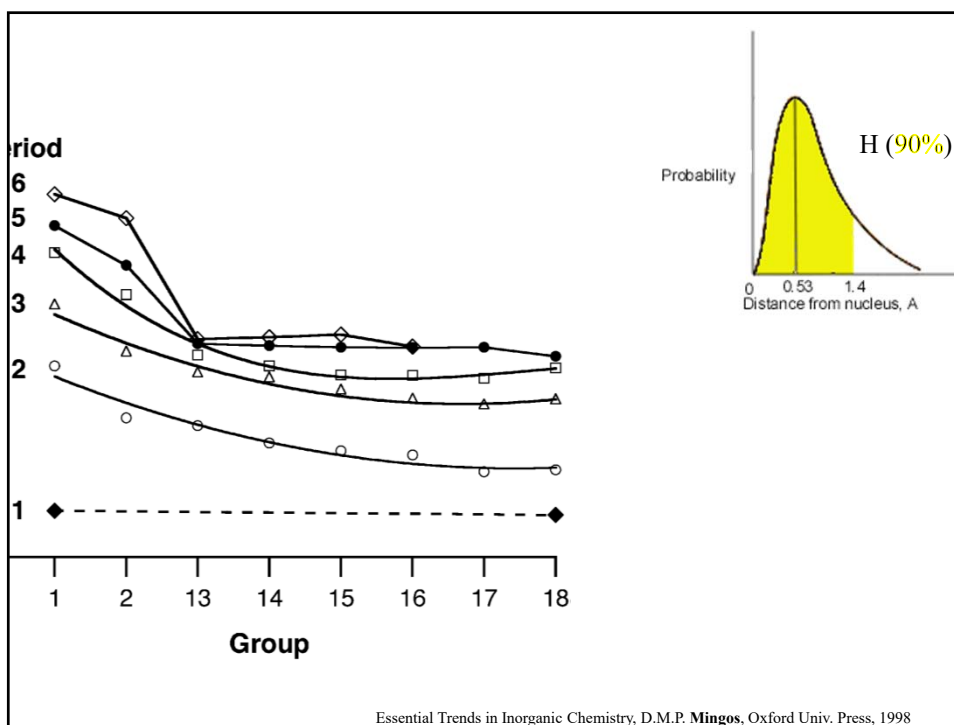
1s
 2s2p
 3s3p
 4s3d4p
 5s4d5p
 6s4f5d6p
 7s5f6d7p

<http://www.tablaperiodica.es/la-tabla-periodica/>

Atomic Radii (pm)

1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8A
Li 152	Be 112	B 85	C 77	N 75	O 73	F 72	Ne 71
Na 186	Mg 160	Al 143	Si 118	P 110	S 103	Cl 100	Ar 98
K 227	Ca 197	Ga 135	Ge 122	As 120	Se 119	Br 114	Kr 112
Rb 248	Sr 215	In 167	Sn 140	Sb 140	Te 142	I 133	Xe 131
Cs 265	Ba 222	Tl 170	Pb 146	Bi 150	Po 168	At (140)	Rn (141)

<http://www.iun.edu/~cpanhd/C101webnotes/modern-atomic-theory/images/atomic-radii.jpg>



Essential Trends in Inorganic Chemistry, D.M.P. Mingos, Oxford Univ. Press, 1998

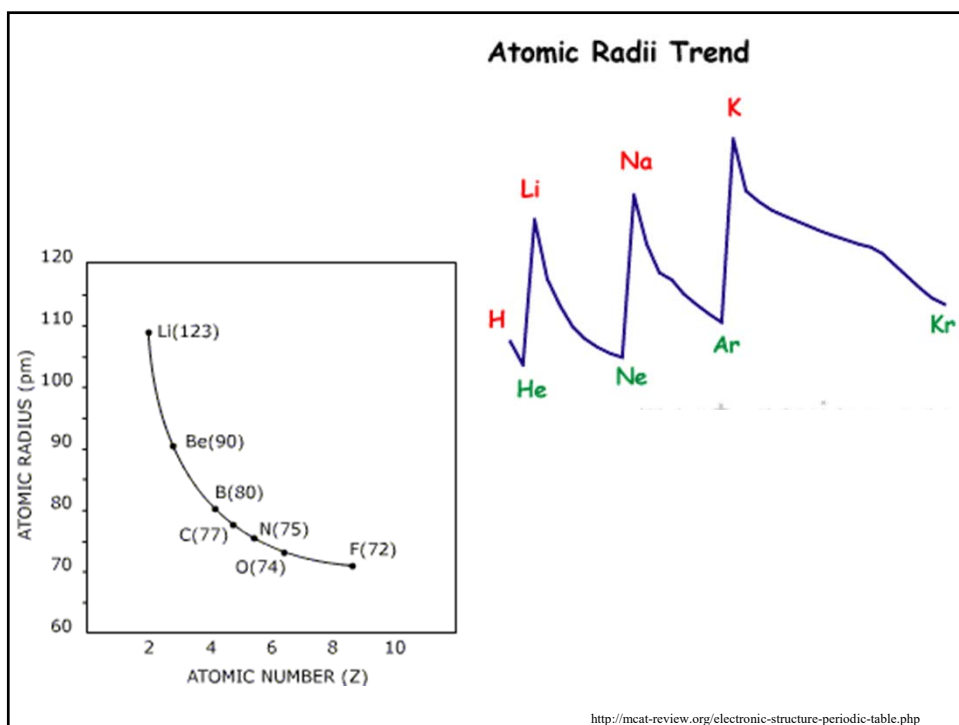
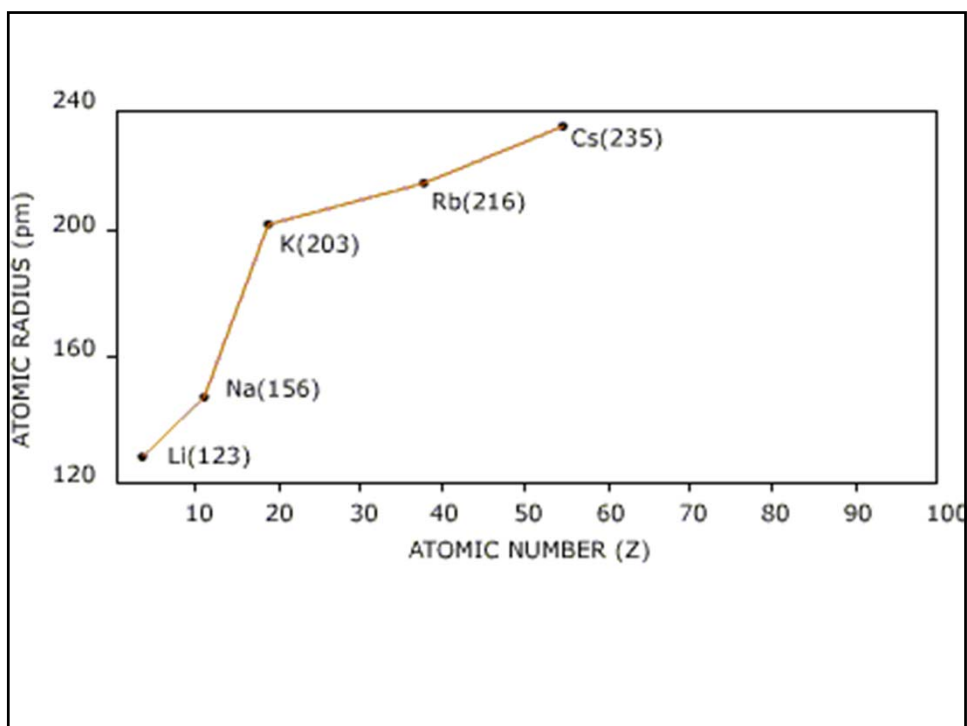
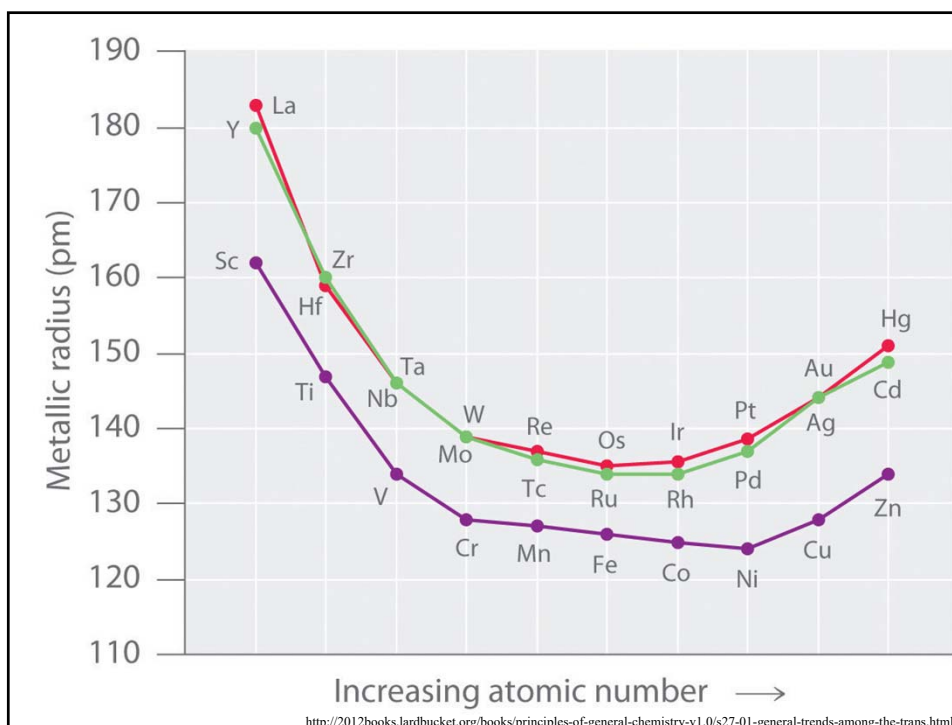


Table 1.11 Values of r_{\max} [relative to that of H ($r_{\max} = 52.918 \text{ pm}$) = 1] for the ns orbitals of hydrogen and the alkali metals

Atom	1s	2s	3s	4s	5s	6s
H	1					
Li	0.364	3.101				
Na	0.093	0.607	3.387			
K	0.053	0.317	1.078	4.330		
Rb	0.026	0.149	0.450	1.270	4.650	
Cs	0.017	0.095	0.272	0.643	1.562	5.138

Essential Trends in Inorganic Chemistry, D.M.P. Mingos, Oxford Univ. Press, 1998



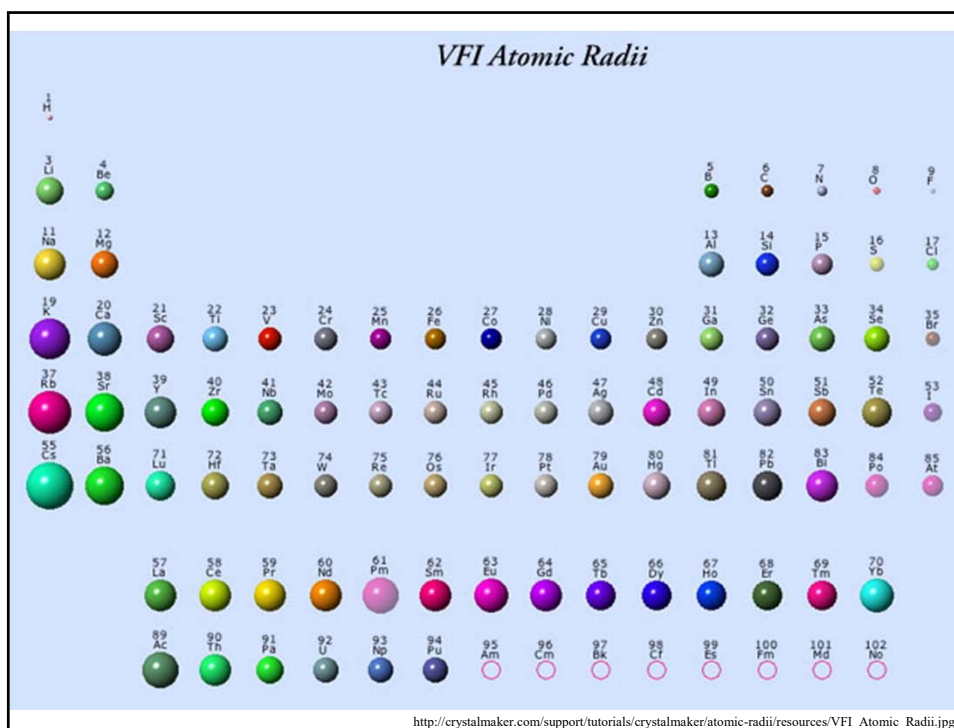


Table 1.14 Values of r_{\max} (pm) and metallic radii, r_{met} (pm), for the nd and $(n+1)s$ valence orbitals of the Group 6 transition metals

	r_{met}	$r_{\max}(nd)$	$r_{\max}((n+1)s)$
Cr	129	46	161
Mo	140	74	168
W	141	79	147

Table 1.15 r_{\max} (pm) for typical lanthanide and actinide elements

Ce[Xe]6s ² 4f ²		U[Rn]7s ² 5d ¹ 4f ³	
4f	38	5f	56
5s	73	6s	72
5p	82	6p	84
5d	116	6d	129
6s	207	7s	194

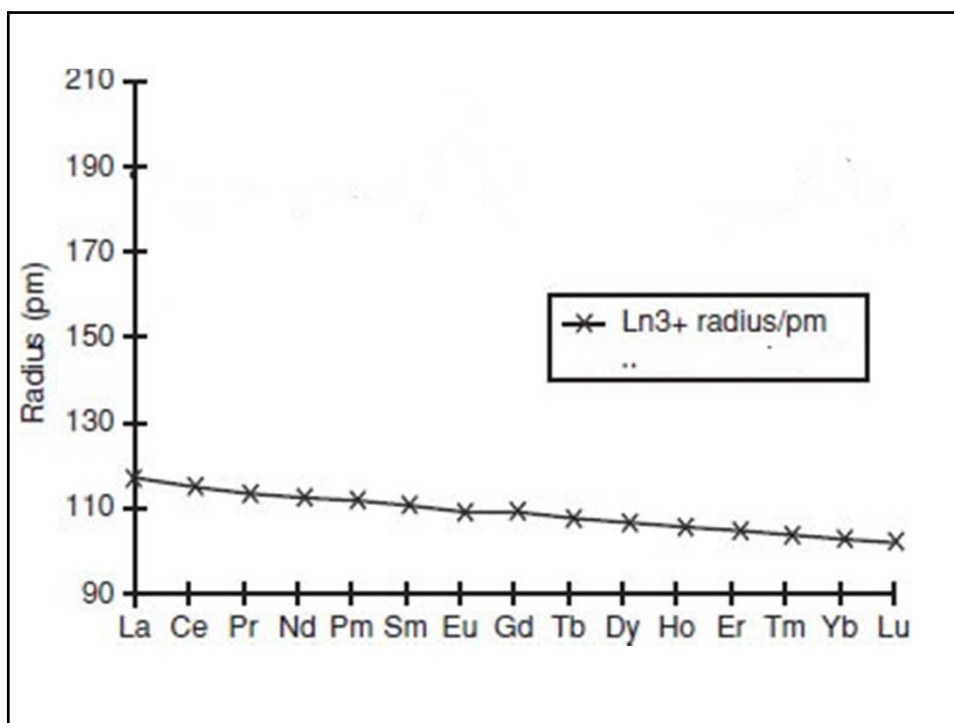
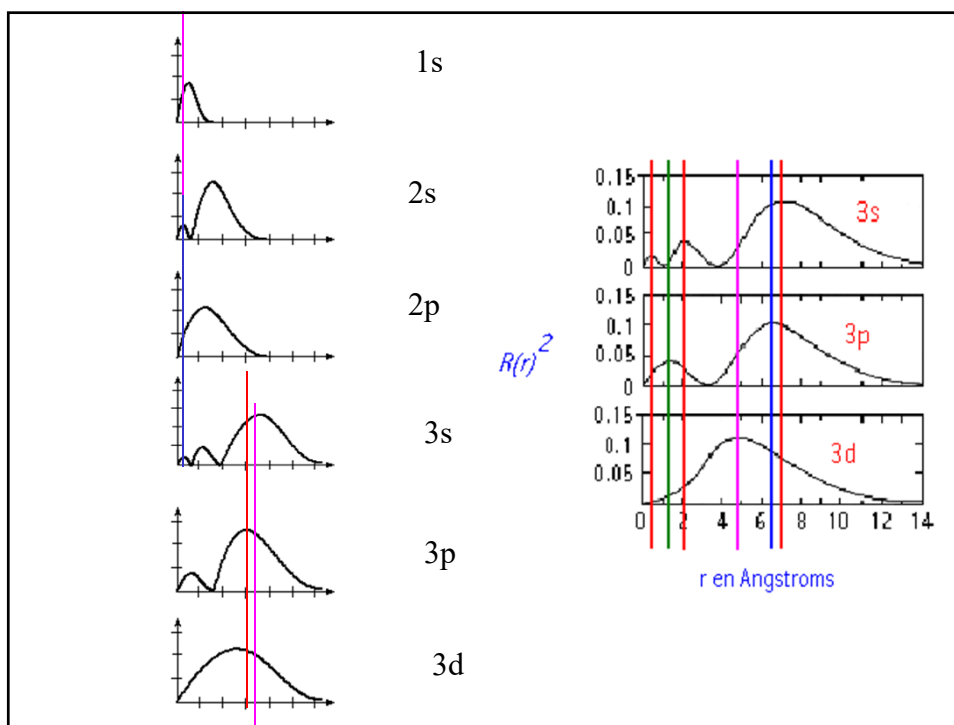
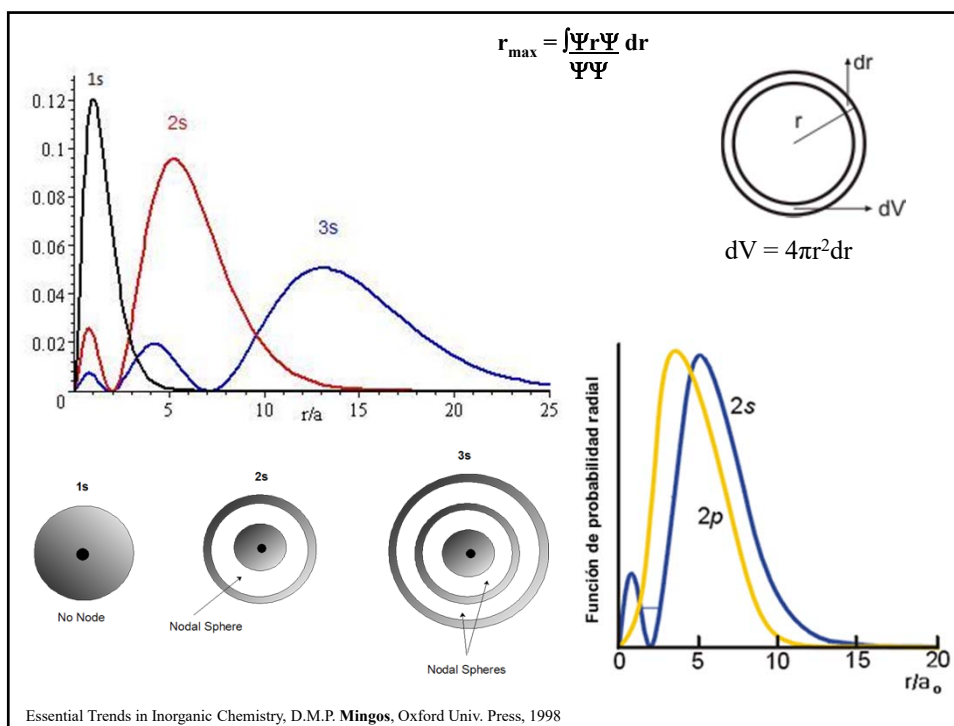
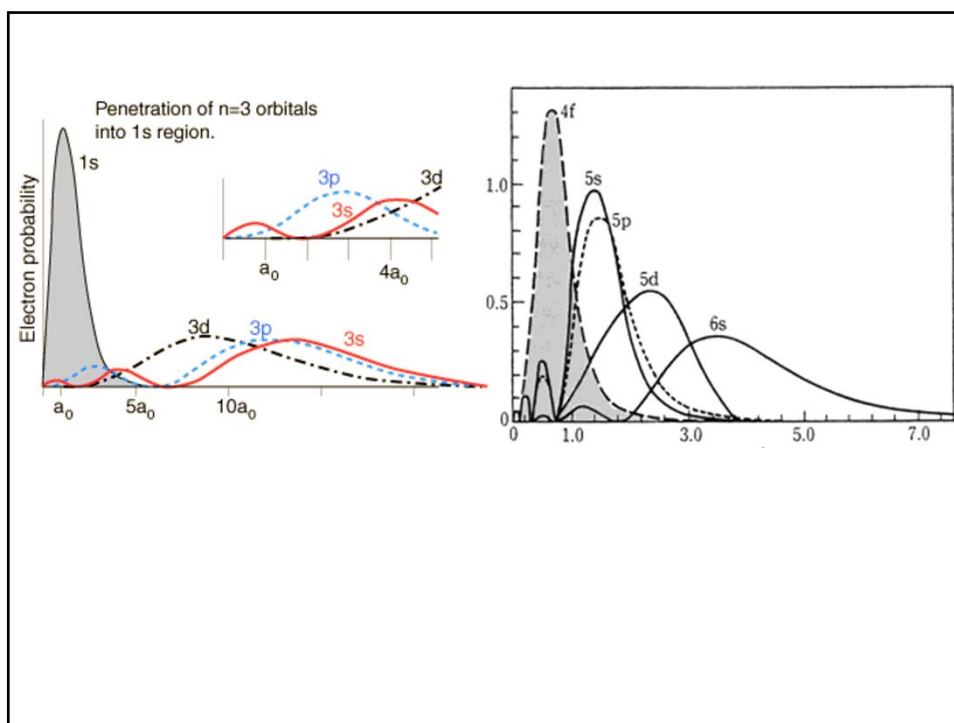


Table 1. Contraction in the r_c Values (3) across the Row of the Periodic Table

Row	Contraction by (%)
2 Li to F ⁻	49
3 Na to Cl	36
4 K to Br	42
5 Rb to I	38
6 Cs to At ^a	38

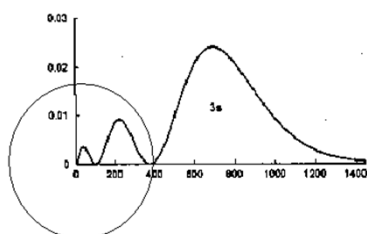
Journal of Chemical Education • Vol. 65 No. 1 1988





$$(4\pi r^2 \Psi^2)$$

- 1) para una misma l (1s-2s-3s), sus máximo se aleja del núcleo,
- 2) para una misma n , $r_{\max} d < p < s$
- 3) Debajo de 400pm, por ejemplo, el total de la densidad electrónica sigue el orden: $s > p > d$.

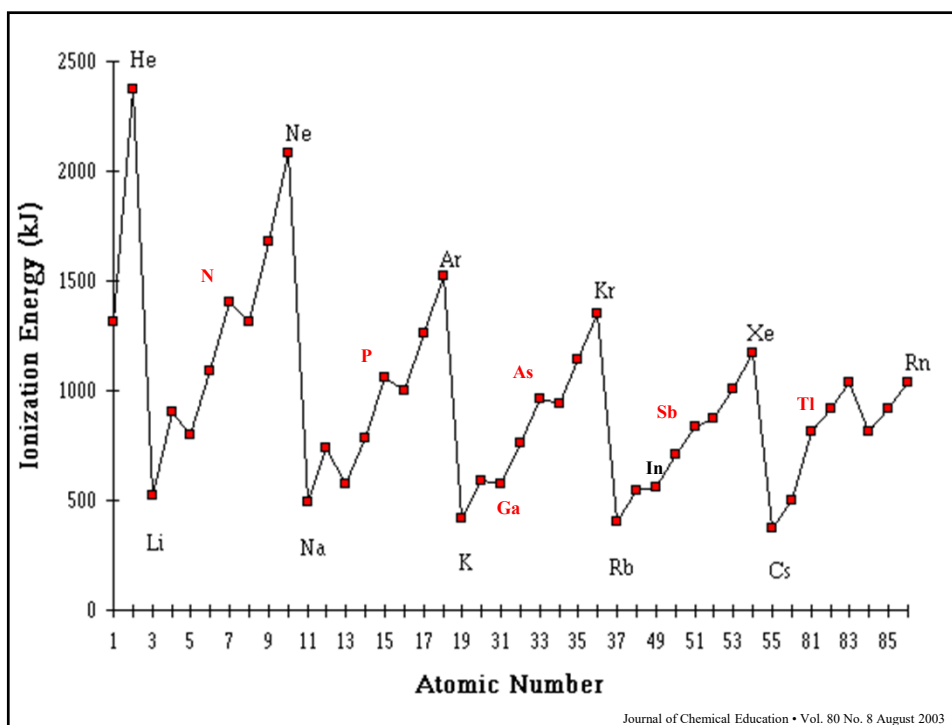




$$\Delta H_{298} = \Delta U_0 + \int_0^{298} C_p(A^+) + C_p(e) - C_p(A) dT$$

si A^+ , A y e son gases ideales, el C_p es cero a $0K$ y $5/2R$ para otra T . Por lo tanto:

$$\Delta H_{298} = \Delta U_0 + \int_0^{298} 5/2 R dT = \Delta U_0 + 5/2 R (298)$$



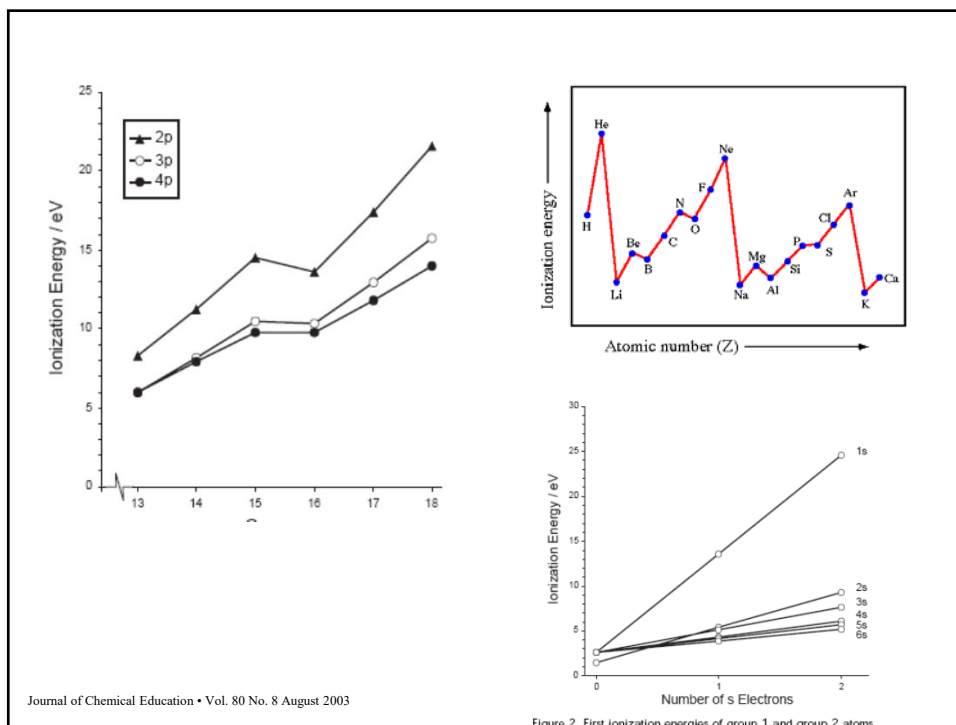
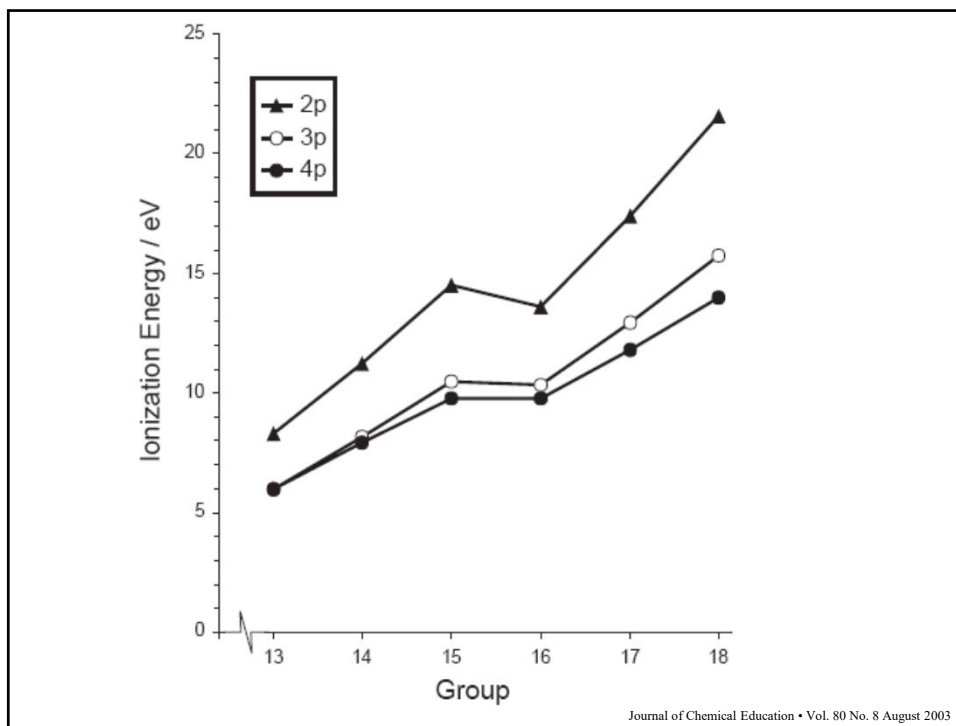
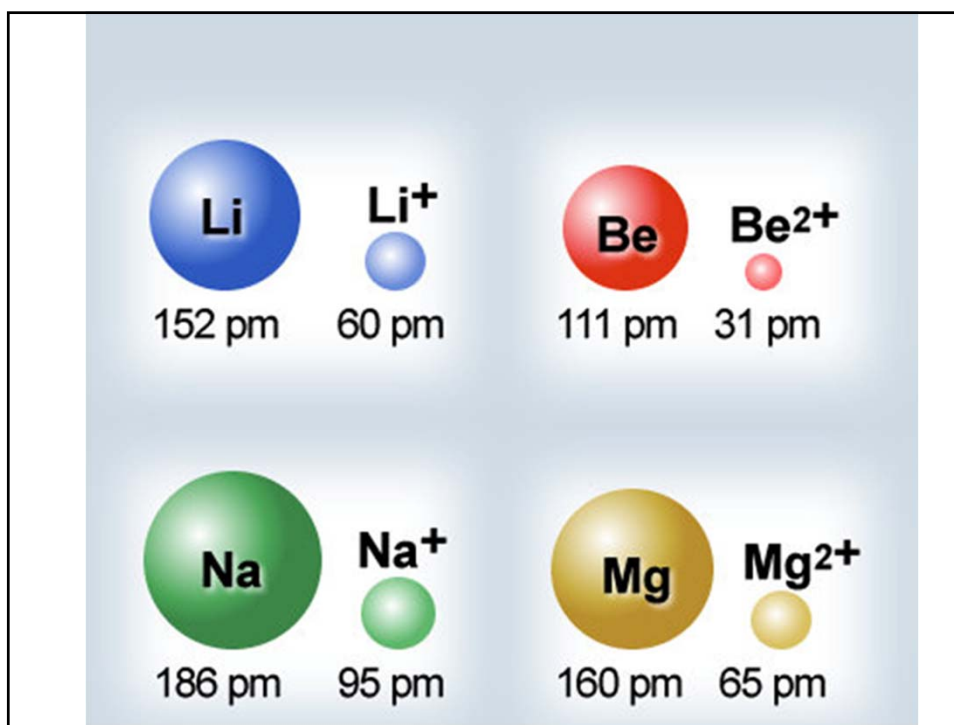
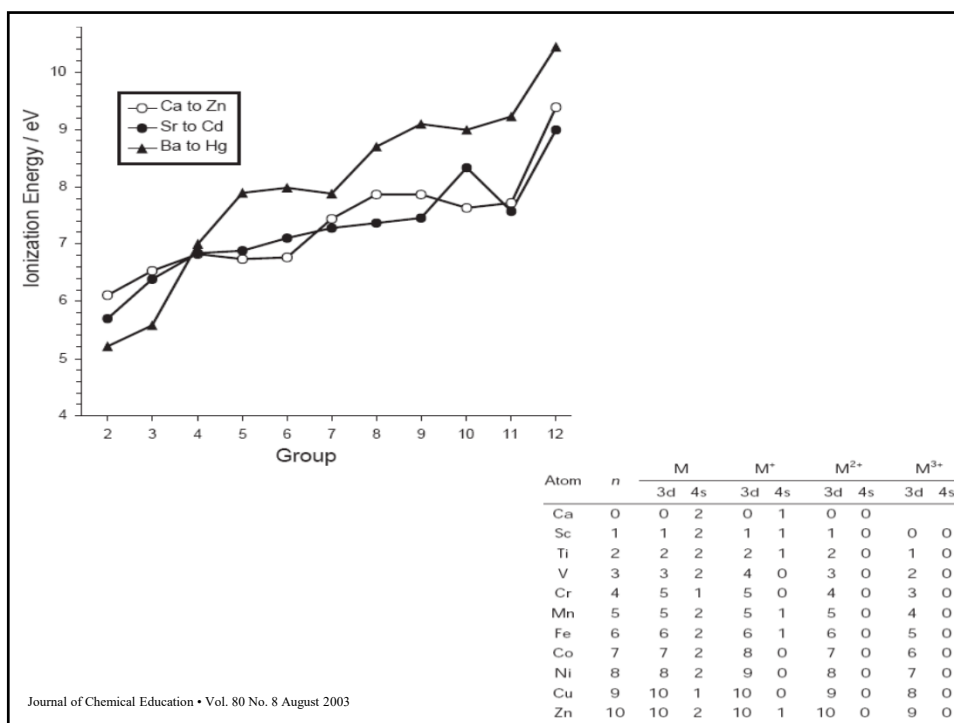


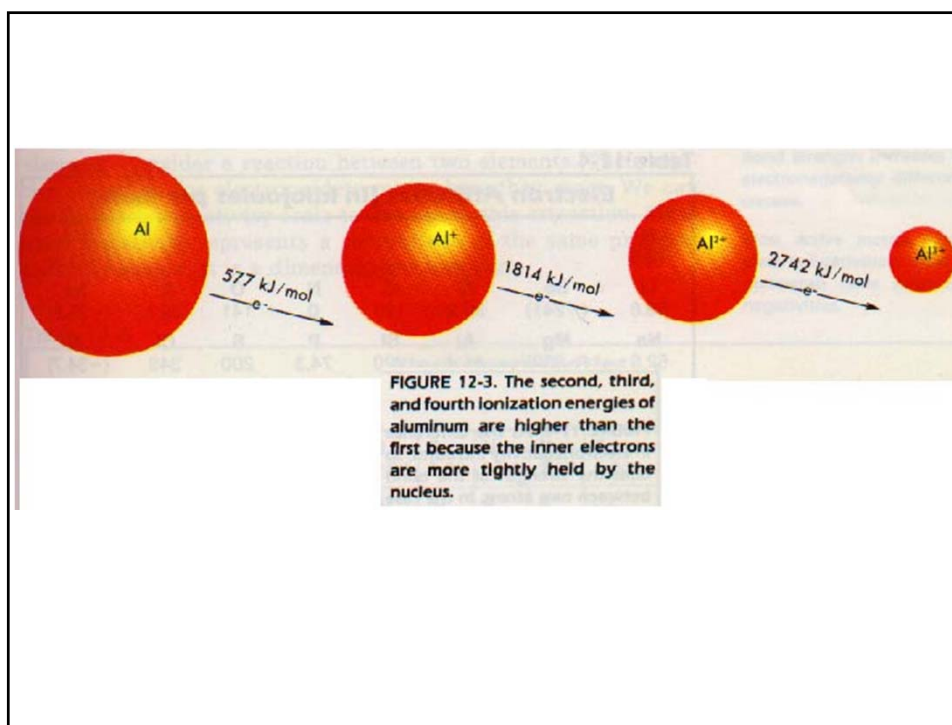
Figure 2. First ionization energies of group 1 and group 2 atoms.

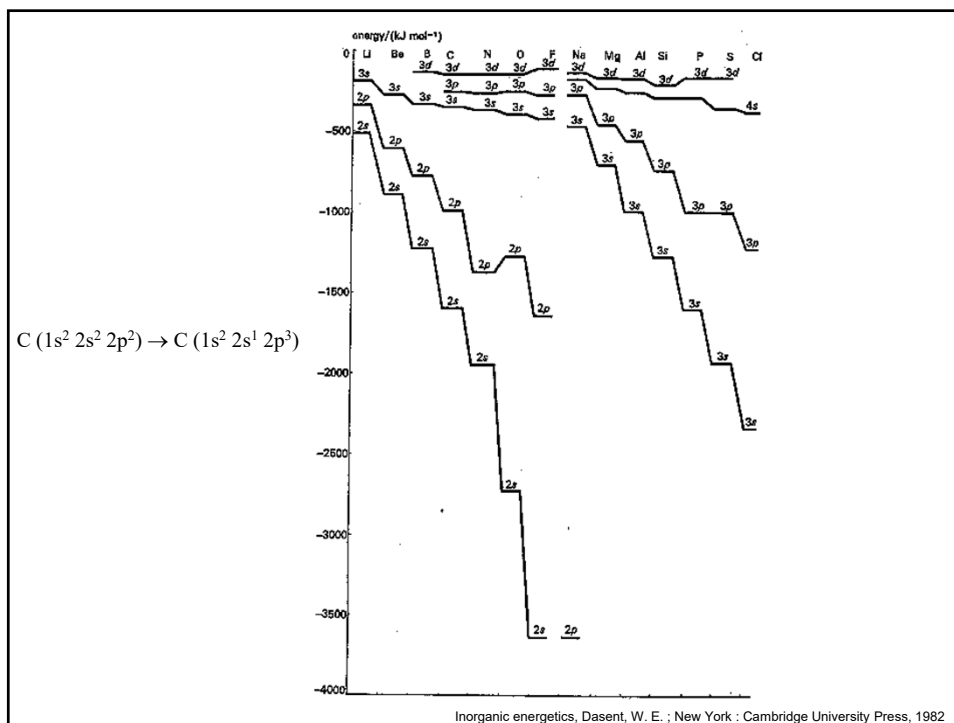
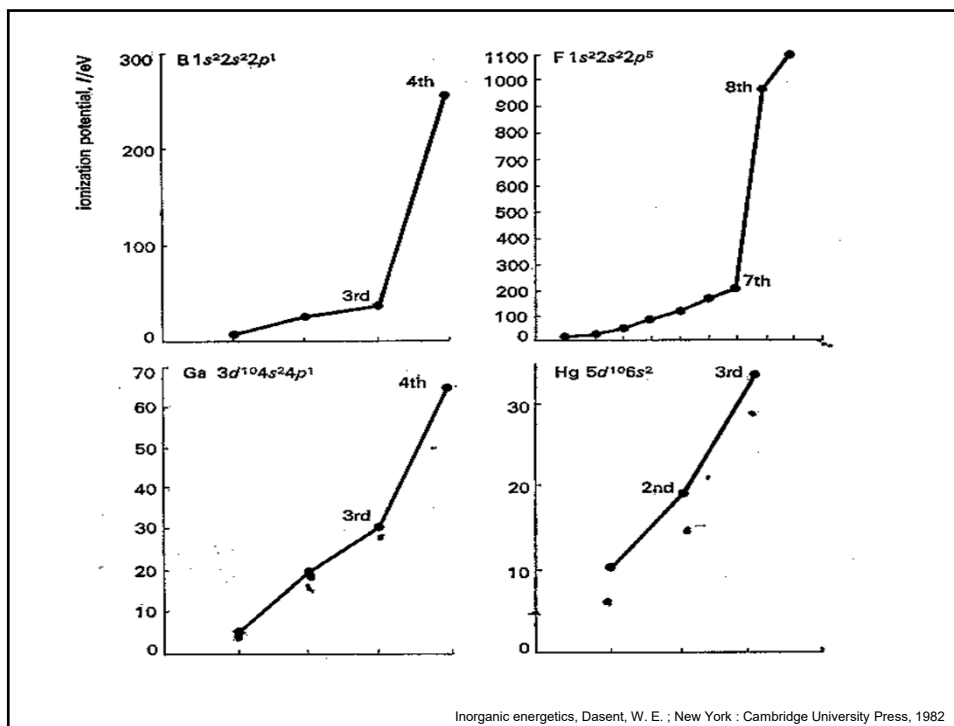


Atomic/Ionic Radii

1A		2A		3A	
Li 1.52	Li⁺ 0.60	Be 1.11	Be²⁺ 0.31		
Na 1.86	Na⁺ 0.95	Mg 1.60	Mg²⁺ 0.65	Al 1.43	Al³⁺ 0.50
K 2.31	K⁺ 1.33	Ca 1.97	Ca²⁺ 0.99	Ga 1.22	Ga³⁺ 0.62
Rb 2.44	Rb⁺ 1.48	Sr 2.15	Sr²⁺ 1.13	In 1.62	In³⁺ 0.81

<https://jahschem.wikispaces.com/ionic+radius>





Afinidad Electrónica



$$\Delta H_{298} = \Delta U_0 + \int_0^{298} C_p(A^-) - C_p(A) - C_p(e) dT$$

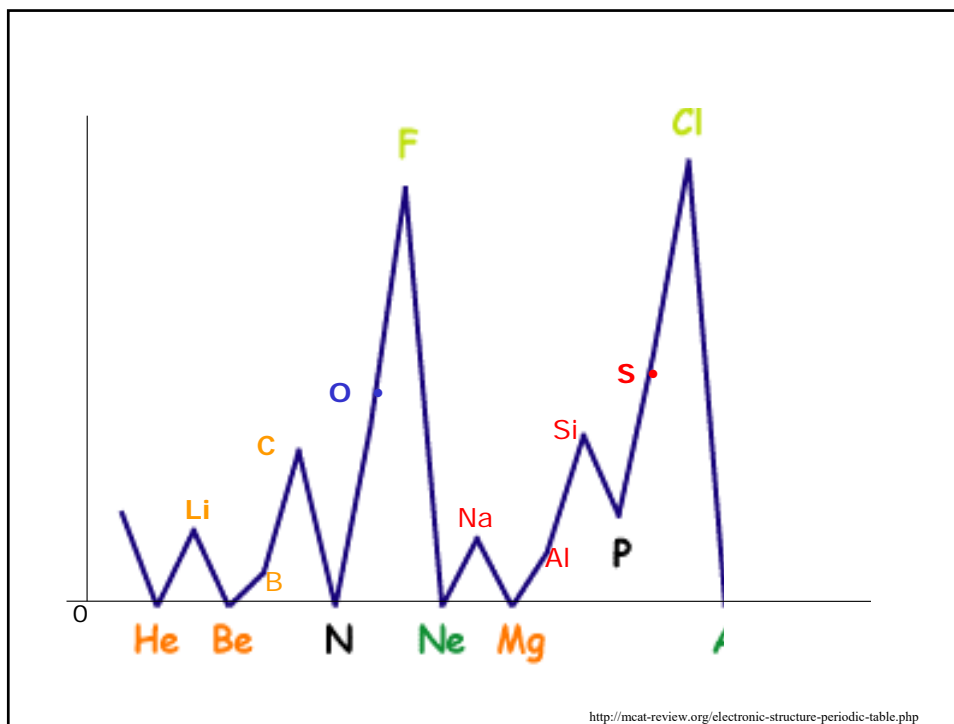
si A^+ , A y e son gases ideales, el C_p es cero a 0K y $5/2R$ para otra T

$$\Delta H_{298} = \Delta U_0 - \int_0^{298} 5/2R dT = \Delta U_0 - 5/2 R (298)$$

Table 15 Electron Affinities, $-\Delta U_0^{\circ}/(\text{kJ mol}^{-1})$ (E/eV), for the Process $X(g) + e \rightarrow X^{-}(g)$

	H						He
	72						-54
	(0.75)						(-0.56)
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
57	-66	15	121	-31	142	333	-99
(0.59)	(-0.68)	(0.16)	(1.25)	(-0.32)	(1.47)	(3.45)	(-1.03)
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	
21	-67	26	135	60	200	348	
(0.22)	(-0.69)	(0.27)	(1.40)	(0.62)	(2.07)	(3.61)	
						Br	
						324	
						(3.36)	
						I	
						295	
						(3.06)	
						At*	
						256	
						(2.69)	

Inorganic energetics, Dasent, W. E.; New York : Cambridge University Press, 1982



Electron Affinities reported in kJ/mol with the right sign.

	1A	2A											3A	4A	5A	6A	7A	8A
	(1)	(2)											(13)	(14)	(15)	(16)	(17)	(18)
			3B	4B	5B	6B	7B	—	8B	—	1B	2B						
			(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)						
1	H -73																	He 0
2	Li -60	Be 18											B -27	C -122	N 7	O -141	F -328	Ne 29
3	Na -53	Mg 21											Al -44	Si -134	P -44	S -200	Cl -349	Ar 35
4	K -48	Ca -2	Sc xx	Ti xx	V xx	Cr xx	Mn xx	Fe xx	Co xx	Ni xx	Cu xx	Zn xx	Ga -30	Ge -116	As -78	Se -195	Br -325	Kr 39
5	Rb -47	Sr -5	Y xx	Zr xx	Nb xx	Mo xx	Tc xx	Ru xx	Rh xx	Pd xx	Ag xx	Cd xx	In -30	Sn -116	Sb -101	Te -190	I -295	Xe 41
6	Cs -46	Ba 46	La xx	Hf xx	Ta xx	W xx	Re xx	Os xx	Ir xx	Pt xx	Au xx	Hg xx	Tl -20	Pb -35	Bi -91	Po -183	At -270	Rn 41
7	Fr xx	Ra xx	Ac xx	Rf xx	Db xx	Sg xx	Bh xx	Hs xx	Mt xx	Ds xx	Rg xx	Uub xx	—	Uuq xx	—	—	—	—

Data taken from John Emsley, *The Elements*, 3rd edition. Oxford: Clarendon Press, 1998
https://www.angelo.edu/faculty/kboudrea/periodic/trends_electron_affinity.ht

