

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

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

### $\Delta H$

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

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

### $\Delta S$

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).

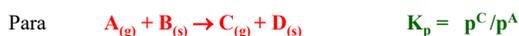
Si los niveles están muy separados para determinada condición, el nivel basal tendrá la mayor ocupación y no contribuirá a la entropía,

### $\Delta G$ 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

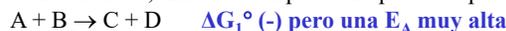
(1 atm  $(1,01325 \times 10^5 \text{ Pa}) \approx 10^5 \text{ Pa}$ )

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

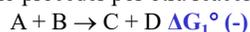
$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ$$

Cuidado con:

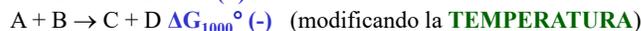
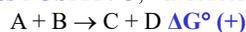
a)  $\Delta G^\circ$  es **NEGATIVO**, • La reacción puede no proceder por **CINÉTICA**



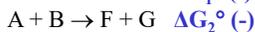
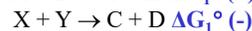
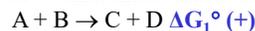
• puede no proceder por otra reacción alterna más favorecida energéticamente



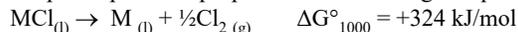
b)  $\Delta G^\circ$  es **POSITIVO**, • la reacción puede proceder bajo condiciones diferentes



• 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

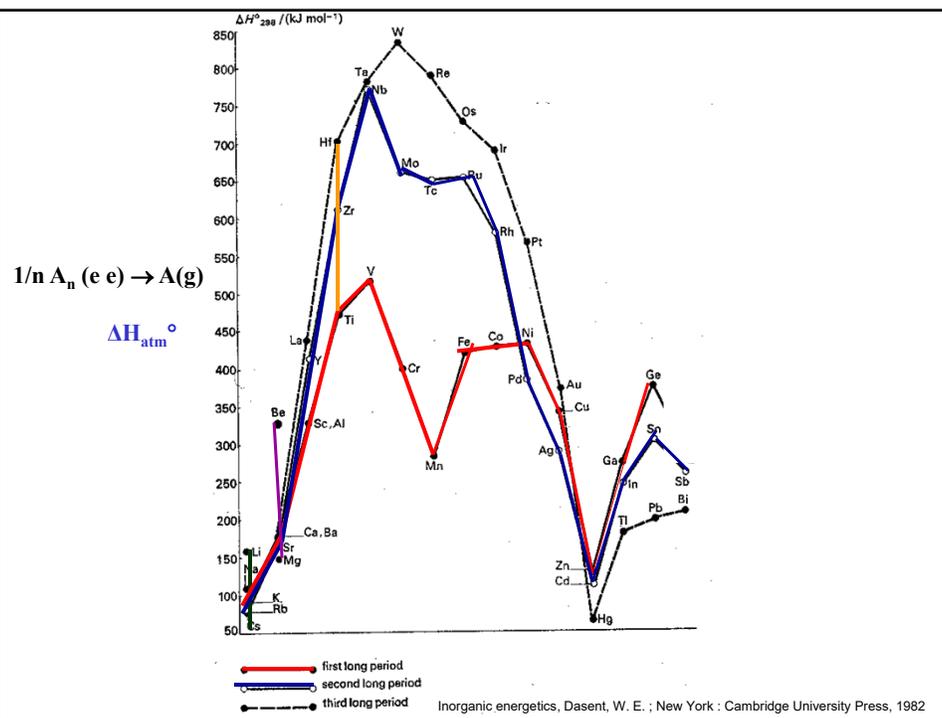
**Ley de Hess:** El cambio de entalpía de una reacción química es el mismo independientemente de la ruta escogida para la reacción, es decir que son **aditivos** (siempre y cuando se realicen en las mismas condiciones). Por lo tanto puedo escoger cualquier ruta de síntesis para conocer los valores **termodinámicos**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

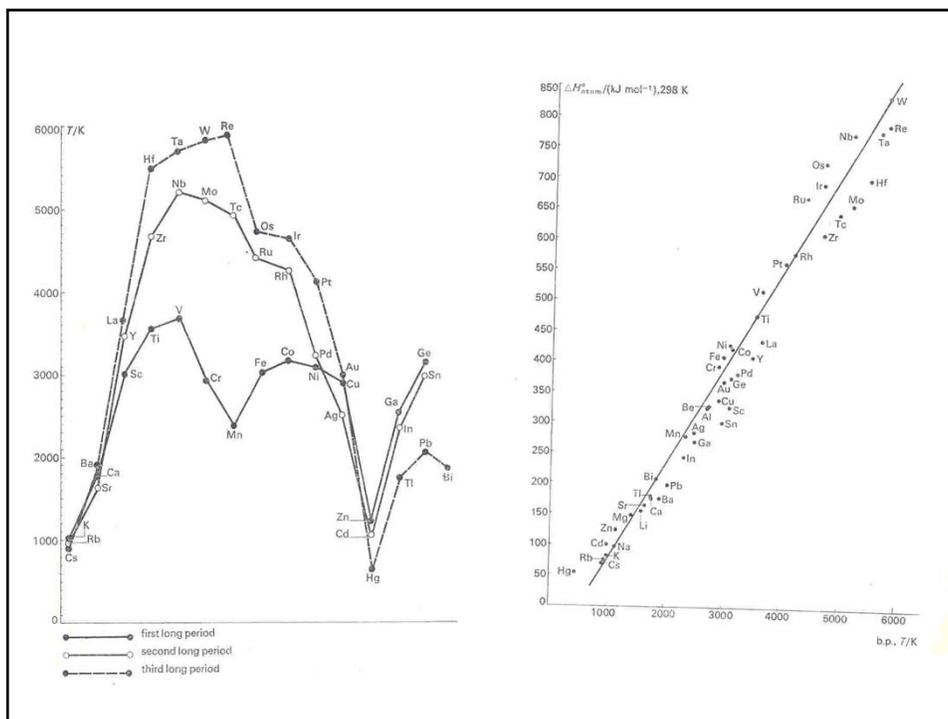
- Temperatura
- Cat

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** ←

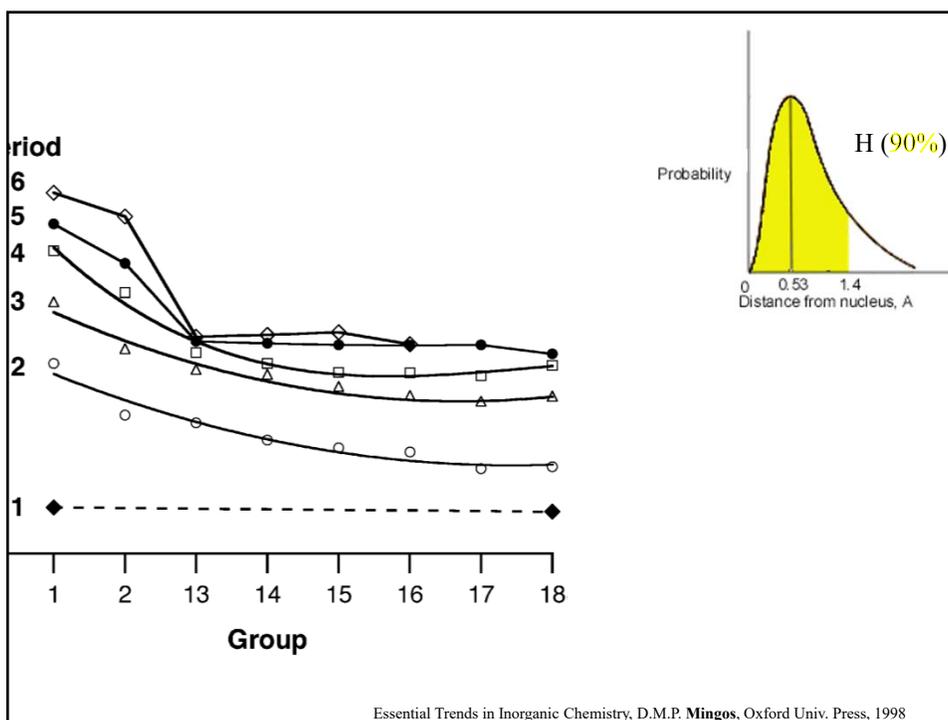
Group	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Period 1	1																	2
1	H																	He
2	3	4											5	6	7	8	9	10
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	11	12											13	14	15	16	17	18
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
4	K	Ca	Sc	Ti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

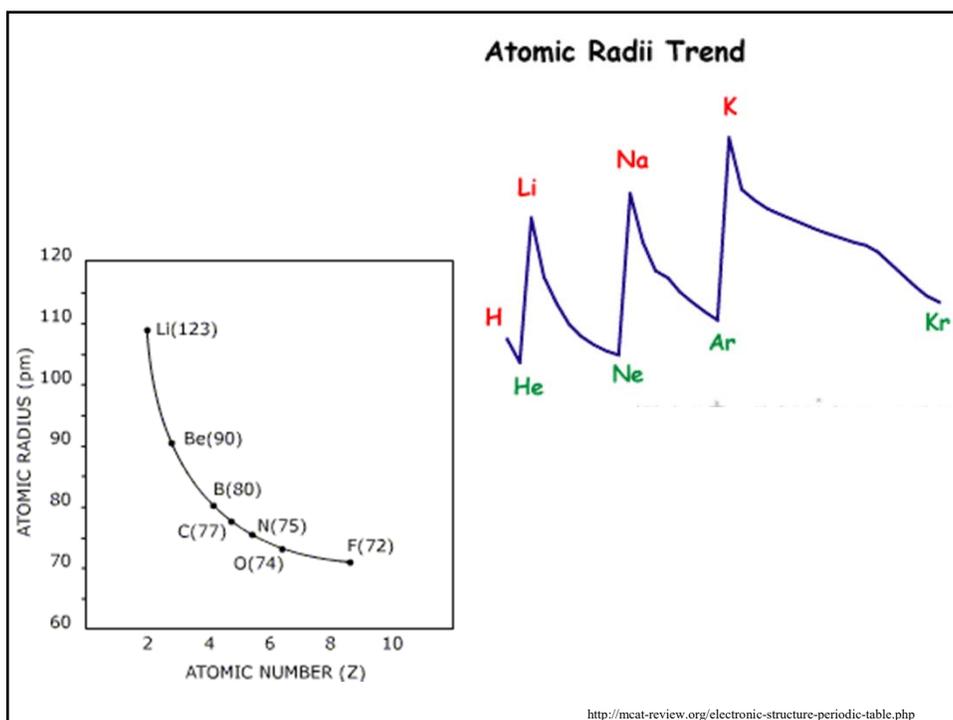
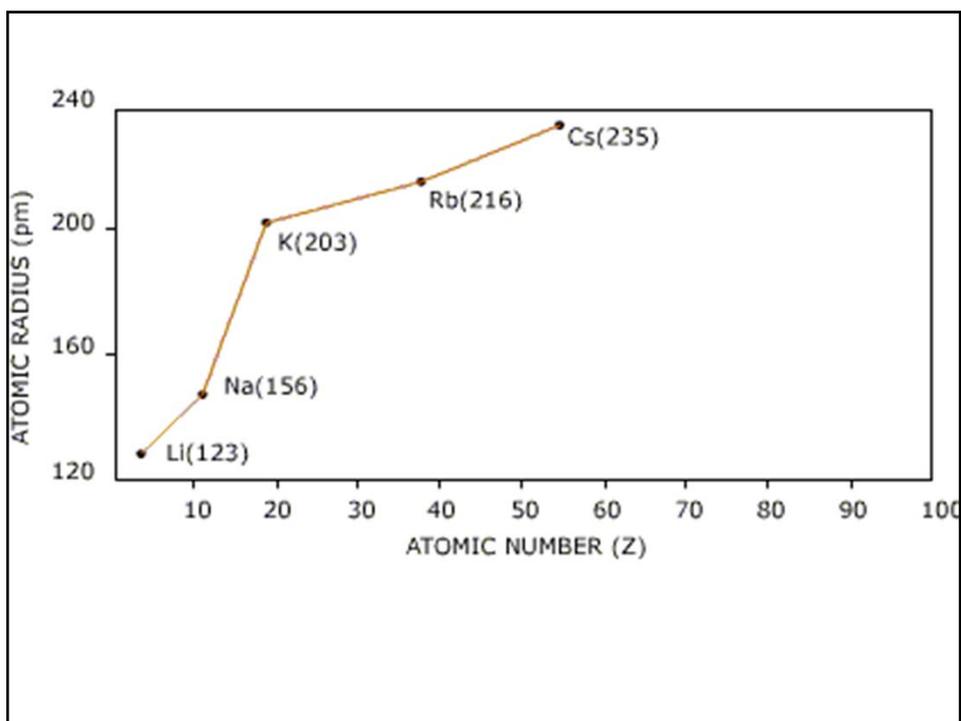
<http://www.tablaperiodica.es/la-tabla-periodica/>

### 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>

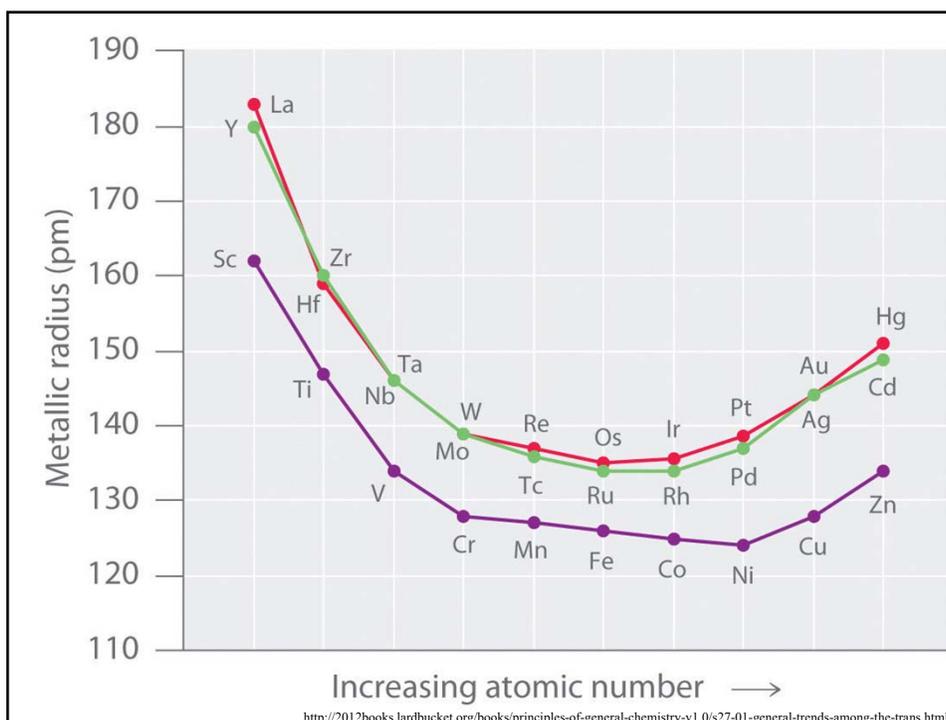


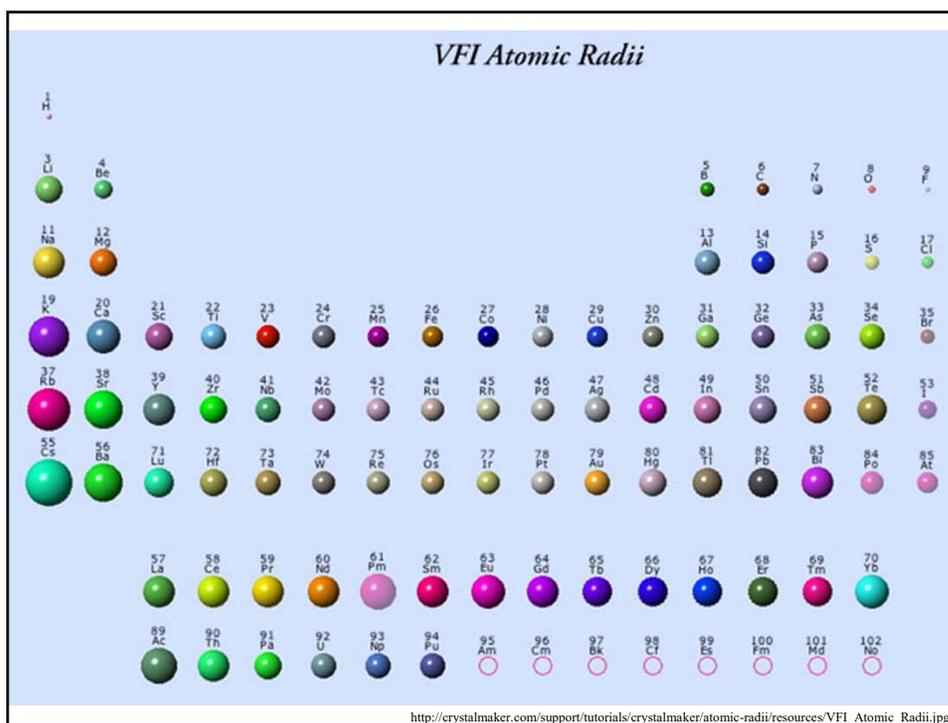


**Table 1.11** Values of  $r_{\max}$  [relative to that of H ( $r_{\max} = 52.918 \text{ pm}$ ) = 1] for the  $ns$  orbitals of hydrogen and the alkali metals

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

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



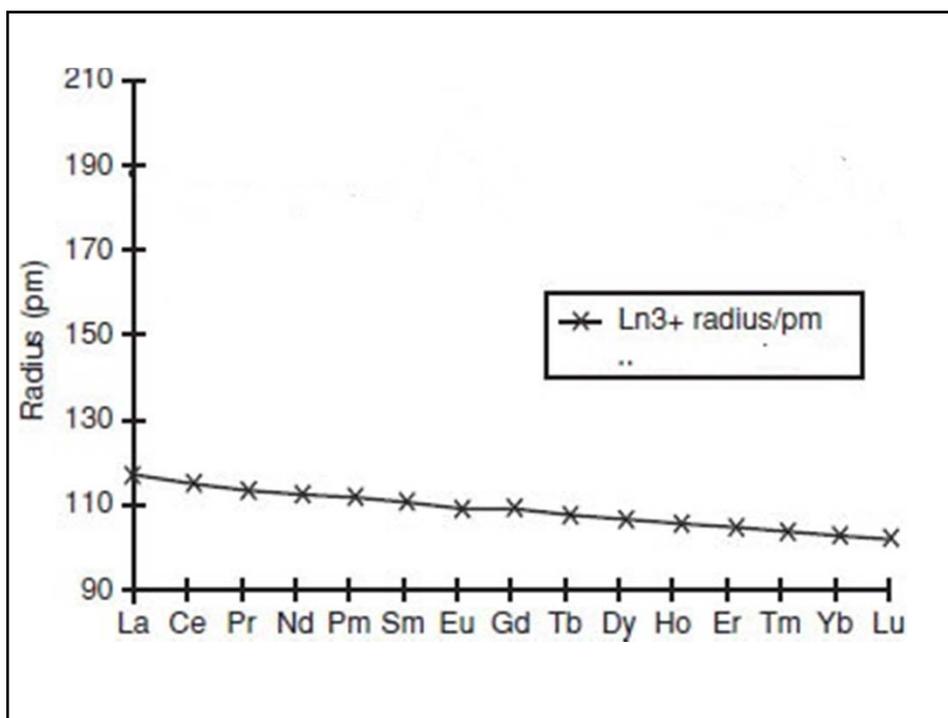


**Table 1.14** Values of  $r_{\max}$  (pm) and metallic radii,  $r_{\text{met}}$  (pm), for the  $nd$  and  $(n+1)s$  valence orbitals of the Group 6 transition metals

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

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

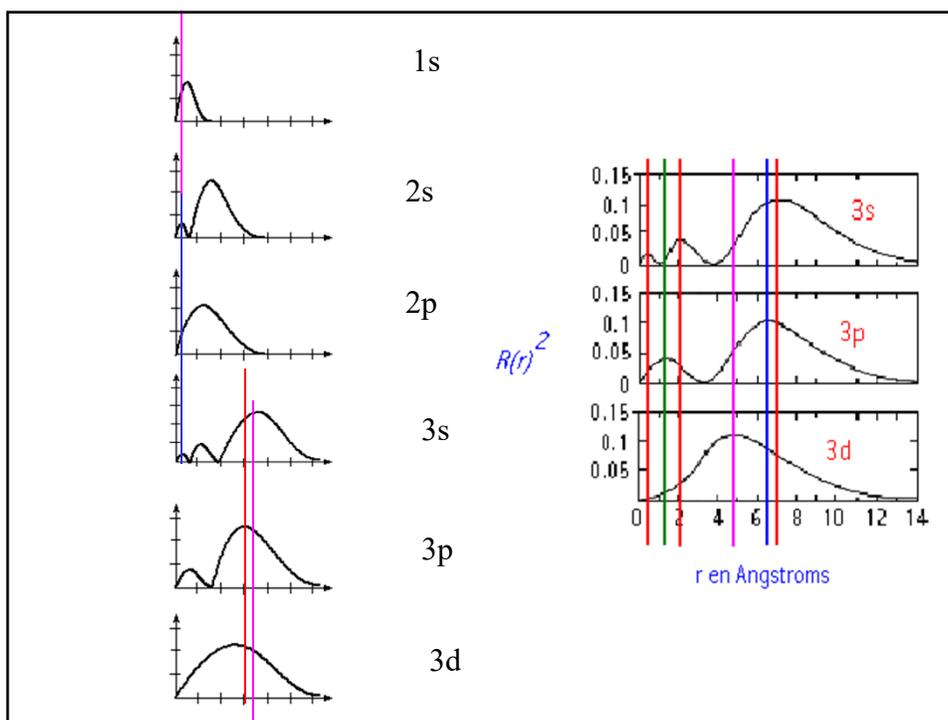
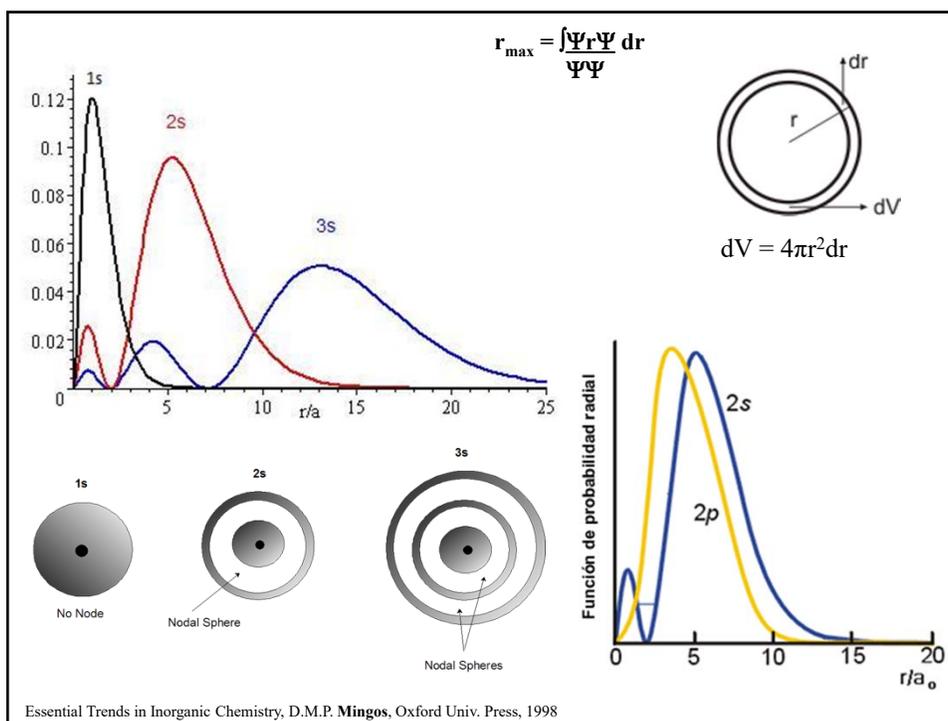
Ce[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>2</sup>		U[Rn]7s <sup>2</sup> 5d <sup>1</sup> 4f <sup>3</sup>	
4f	38	5f	56
5s	73	6s	72
5p	82	6p	84
5d	116	6d	129
6s	207	7s	194

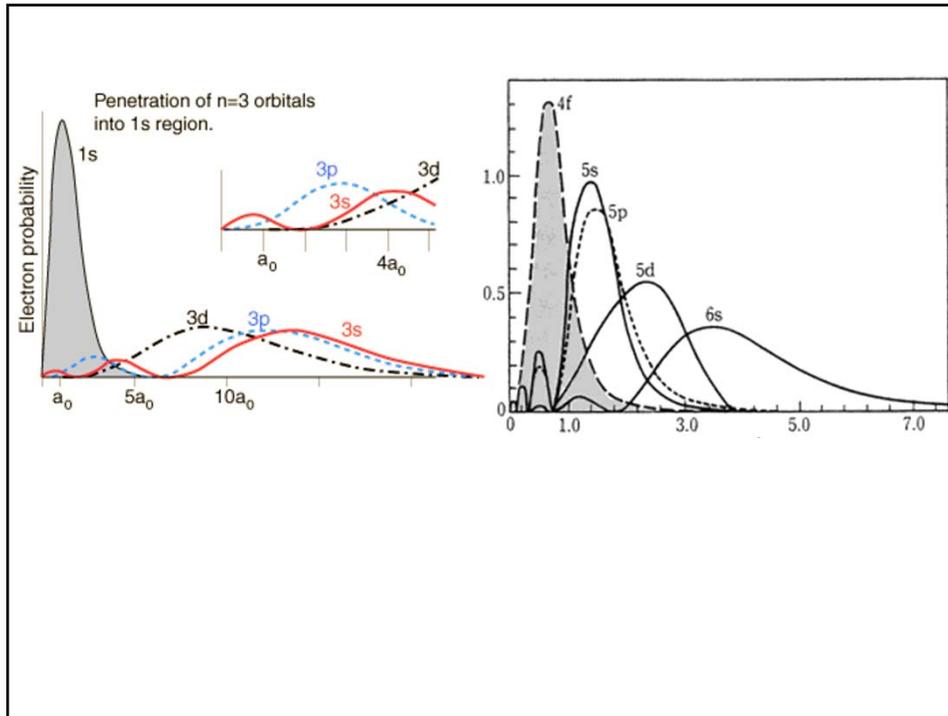


**Table 1. Contraction in the  $r_c$  Values (3) across the Row of the Periodic Table**

Row	Contraction by (%)
2    Li to F <sup>-</sup>	49
3    Na to Cl	36
4    K to Br	42
5    Rb to I	38
6    Cs to At <sup>a</sup>	38

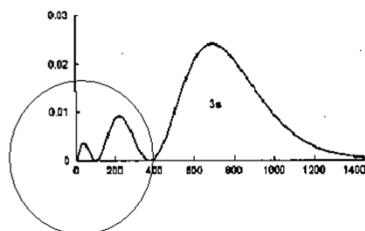
Journal of Chemical Education • Vol. 65 No. 1 1988





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

- 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:  $s > p > d$ .

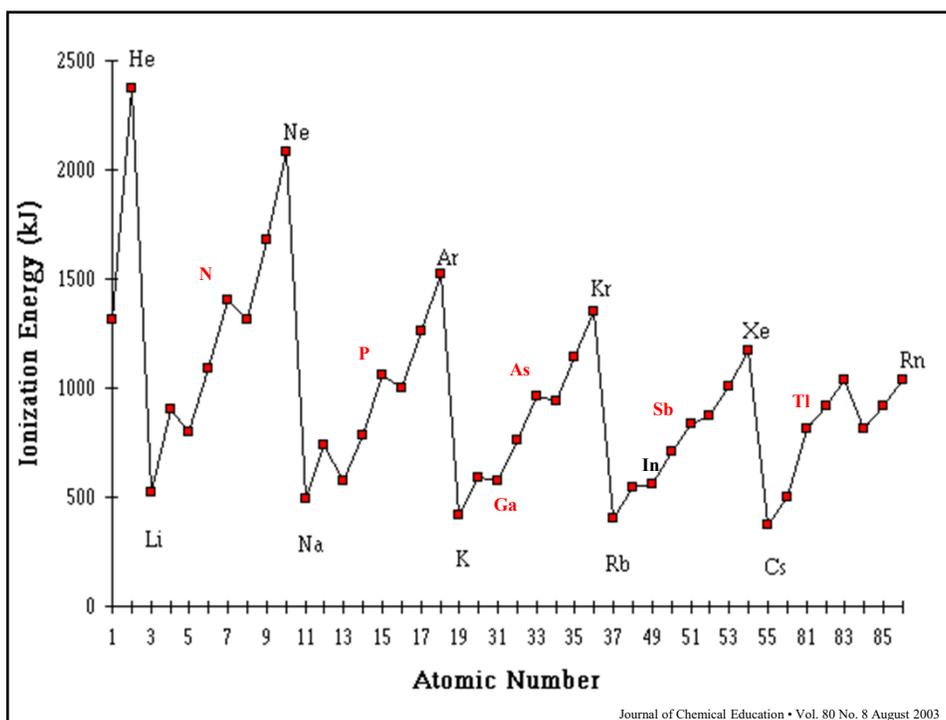


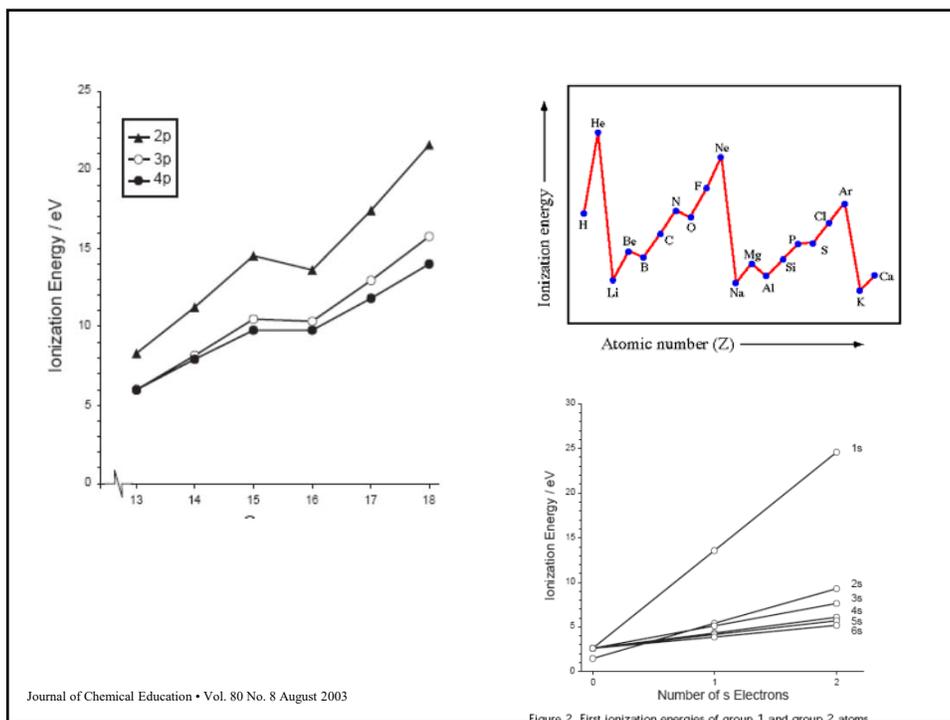
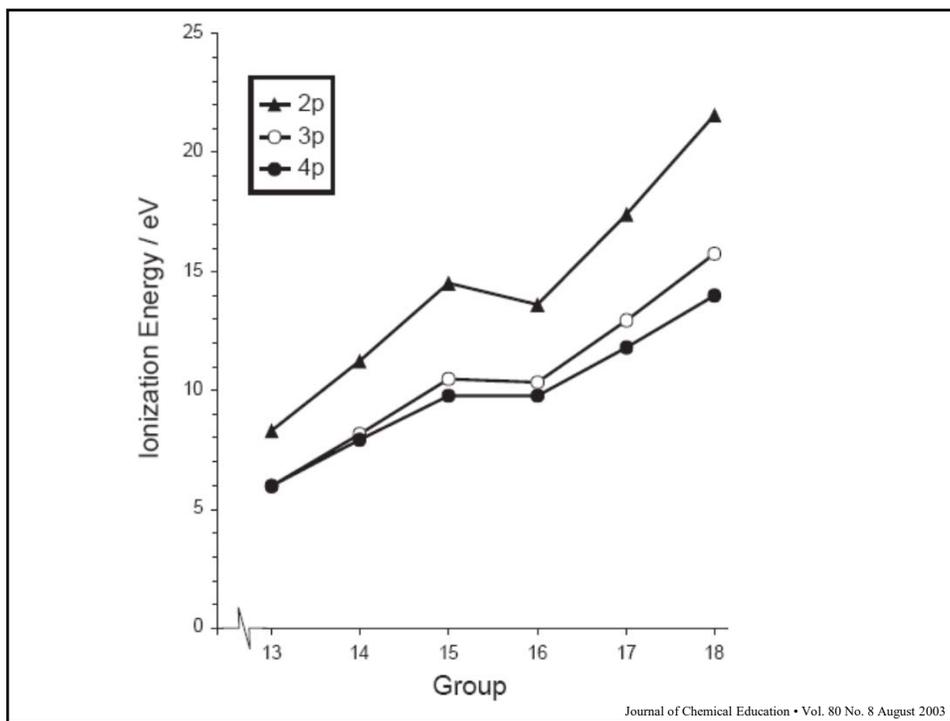


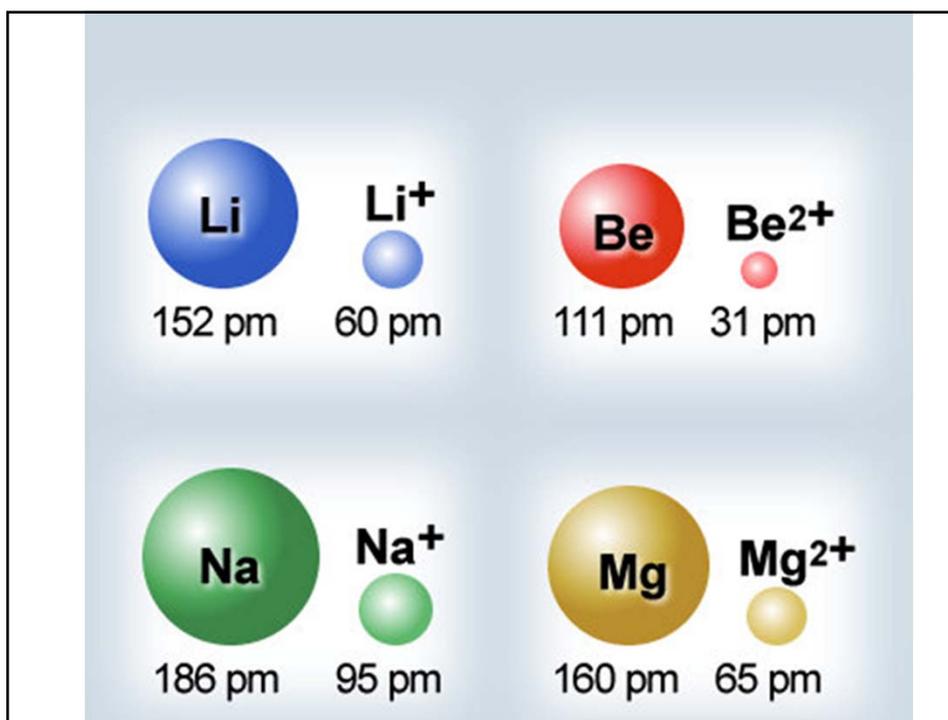
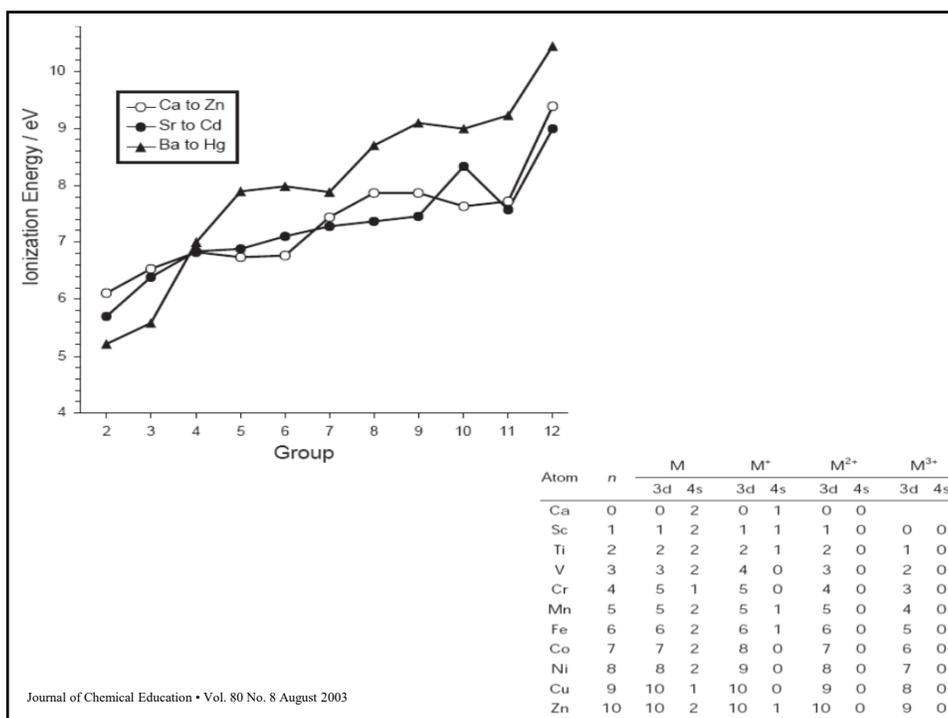
$$\Delta H_{298} = \Delta U_0 + \int_0^{298} C_p(A^+) + C_p(e) - C_p(A) dT$$

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

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



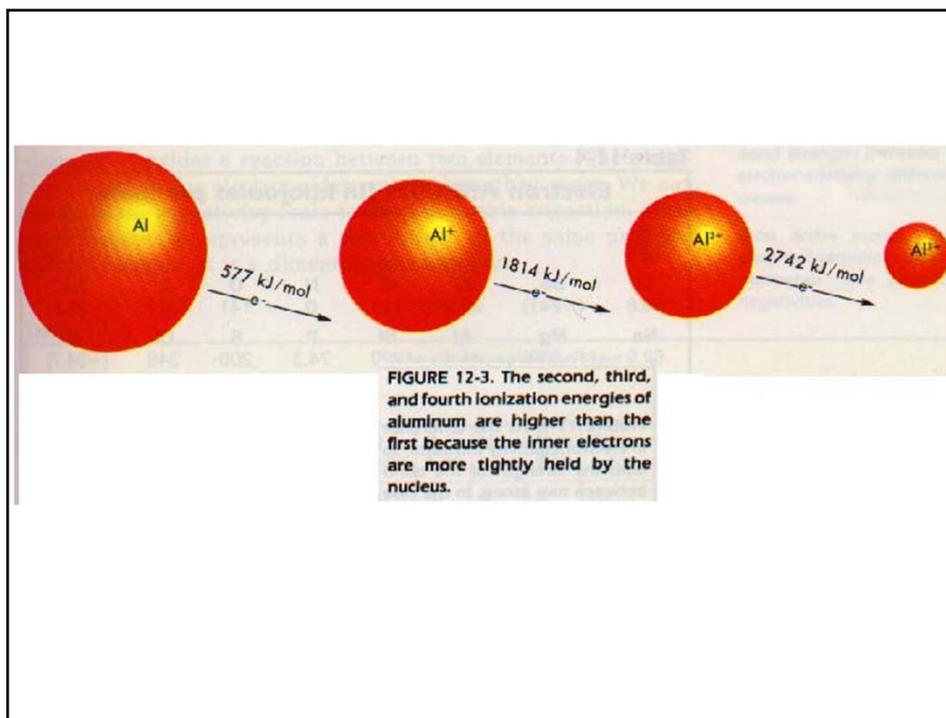


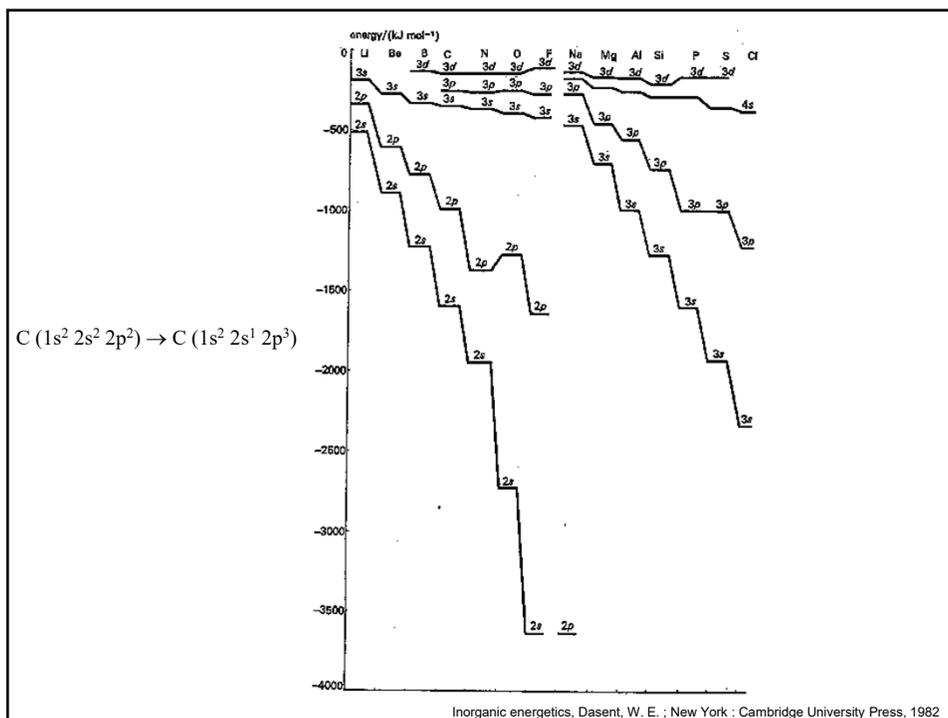
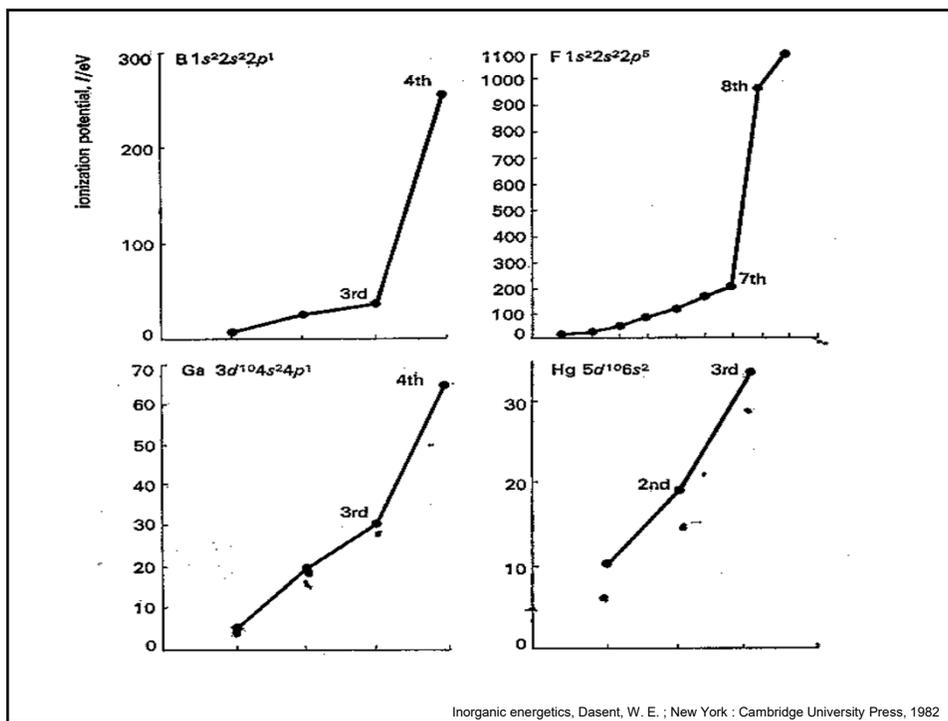


# Atomic/Ionic Radii

1A		2A		3A	
<b>Li</b> 1.52	<b>Li<sup>+</sup></b> 0.60	<b>Be</b> 1.11	<b>Be<sup>2+</sup></b> 0.31		
<b>Na</b> 1.86	<b>Na<sup>+</sup></b> 0.95	<b>Mg</b> 1.60	<b>Mg<sup>2+</sup></b> 0.65	<b>Al</b> 1.43	<b>Al<sup>3+</sup></b> 0.50
<b>K</b> 2.31	<b>K<sup>+</sup></b> 1.33	<b>Ca</b> 1.97	<b>Ca<sup>2+</sup></b> 0.99	<b>Ga</b> 1.22	<b>Ga<sup>3+</sup></b> 0.62
<b>Rb</b> 2.44	<b>Rb<sup>+</sup></b> 1.48	<b>Sr</b> 2.15	<b>Sr<sup>2+</sup></b> 1.13	<b>In</b> 1.62	<b>In<sup>3+</sup></b> 0.81

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





## Afinidad Electrónica



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

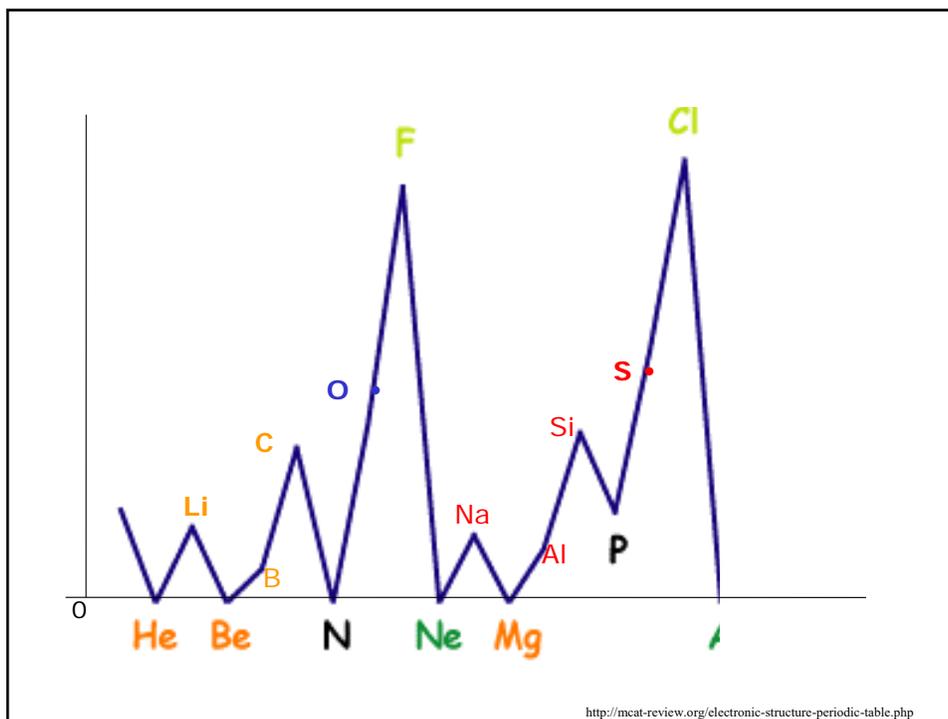
si  $A^+$ ,  $A$  y  $e$  son gases ideales, el  $C_p$  es cero a  $0K$  y  $5/2R$  para otra  $T$

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

**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](https://www.angelo.edu/faculty/kboudrea/periodic/trends_electron_affinity.ht)

