

Números de oxidación:

Asignar números o estados de oxidación es algo que la mayoría de la personas que nos dedicamos a la práctica de la química aprendimos a hacer desde nuestras primeras lecciones en la materia. Desafortunadamente, en la mayoría de los casos, asignarlos y entenderlos no forman parte del mismo paquete.

Si se le pide a un alumno que asigne los estados de oxidación tanto del hidrógeno como del oxígeno en el agua, muy probablemente los asignen correctamente, sin embargo al preguntar ¿qué significado tienen estos números? muy probablemente la respuesta sería: significa que el hidrógeno “trabaja” con +1 y el oxígeno “trabaja” con -2.

Adicionalmente, debido al desconocimiento del significado de los estados de oxidación, al intentar asignar los estados de oxidación en compuestos orgánicos, frecuentemente nos encontramos con “sorpresas”, por ejemplo: En el ácido propiónico, ($C_3H_6O_2$), $H = +1$, $O = -2$, $C = ?$, en el ácido acético: $C_2H_4O_2$, $H = +1$, $O = -2$, $C = ?$. Incluso en los compuestos inorgánicos pueden presentarse valores inesperados: por ejemplo al azufre en el tetratiónato de sodio $Na_2S_4O_6$ le corresponde un estado de oxidación de $+2.5$?

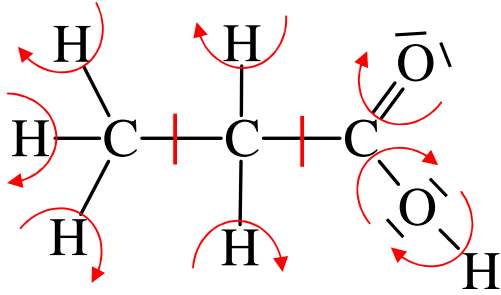
- **Los estados de oxidación no son otra cosa que la carga que asignamos a los átomos en una molécula o ión, partiendo de la suposición de que todos los enlaces presentes en esta son 100% iónicos.**

Esta suposición es por supuesto errónea y ficticia. Sin embargo, la asignación de números de oxidación es útil para calcular el número de electrones intercambiados en reacciones redox.

Es práctica común calcular los estados de oxidación empleando las fórmulas mínimas de los compuestos (como en el los casos ilustrados anteriormente), lo cual conduce a que el número calculado no necesariamente sea un número entero. Cuando se emplean fórmulas mínimas para el cálculo de los estados de oxidación, lo que se obtiene es el **promedio** de estos. De esta forma, si cada uno de los átomos de carbono en el ácido propiónico presenta un estado de oxidación diferente: -3, -2 y +3, todos ellos números enteros, el promedio de estos no es un número entero: $-2/3$.

Para poder calcular de forma más precisa el estado de oxidación de cada uno de los átomos de una sustancia, es necesario conocer la estructura de Lewis que la representa.

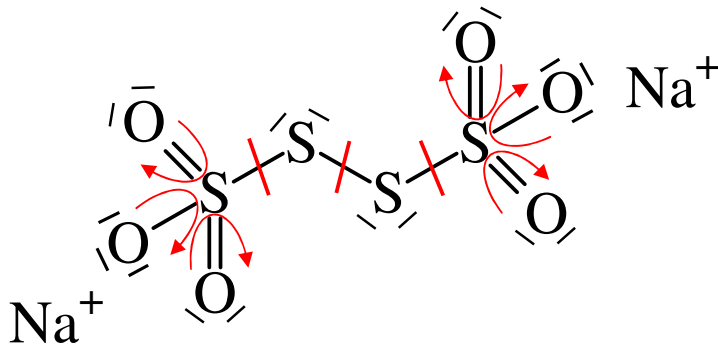
Las estructuras de Lewis son una representación de la distribución de los **electrones de valencia de los átomos** en una molécula. A partir de la estructura de Lewis, y tomando en cuenta que, para el cálculo de números de oxidación se considera que todos los enlaces son 100% iónicos, el par de electrones compartidos en cualquier enlace heteronuclear, (aquel formado entre dos átomos distintos), se le asignan o cuentan a la especie más electronegativa. En el caso de que los átomos que comparten electrones tengan la misma electronegatividad, (como es el caso de los enlaces C-C), de cada par electrónico en el enlace se asigna 1 electrón a cada uno de los átomos participantes, por ejemplo, para el ácido propiónico $C_3H_6O_2$:



Alrededor de cada uno de los átomos de oxígeno podemos contar ocho electrones de valencia, (un átomo de oxígeno neutro posee solo seis electrones de valencia), por lo que esta forma de asignar electrones conduce a asignar 2 electrones adicionales a cada átomo de oxígeno, por lo que la carga que le corresponde, o lo que es lo mismo, el número de oxidación es de -2. En el caso de los átomos de hidrógeno, ninguno de ellos posee electrones en su entorno, por lo que a todos ellos les corresponde un estado de oxidación de +1.

En el caso de los átomos de carbono, claramente cada uno de ellos posee un diferente número de electrones en su entorno. En el grupo $-\text{CH}_3$, el carbono está rodeado de 7 electrones, mientras que en el $-\text{CH}_2-$ solo se rodea de 6 y en el grupo $-\text{CO}_2\text{H}$ es posible contar solo 1 electrón alrededor del átomo de carbono. Como los átomos de carbono neutros poseen 4 electrones de valencia, como resultado de la “repartición” de electrones los estados de oxidación obtenidos por este método son: -3 para el carbono en el grupo $-\text{CH}_3$, -2 para el carbono en el grupo $-\text{CH}_2$ y +3 para el átomo de carbono en el grupo $-\text{CO}_2\text{H}$. (-2/3 en **promedio** para cada átomo de carbono)

Para el tetrationato de sodio:

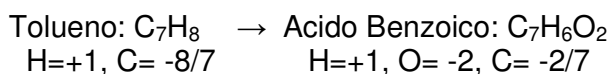


En esta estructura se observa que no todos los átomos de azufre son iguales. Alrededor de los átomos de azufre de los grupos $-\text{SO}_3$ solo podemos contar 1 electrón, mientras que alrededor de cada uno de los átomos de azufre intermedios $-\text{S}-$ hay 6 electrones.

Puesto que los átomos de azufre tienen 6 electrones de valencia (cuando son neutros), ambos átomos de azufre de los grupos $-\text{SO}_3$ presentan un estado de oxidación +5, mientras que los dos átomos de azufre intermedios presentan un estado de oxidación de cero (en **promedio**: $(5+5+0+0)/4 = +2.5$). Es importante mencionar que los átomos de azufre intermedios solo están unidos a otro átomo de azufre, por lo que el hecho de que el cálculo genere un estado de oxidación de cero es consistente con la definición de que todo átomo combinado únicamente con otro de su misma especie debe presentar un estado de oxidación de cero.

Esta forma de calcular estados de oxidación puede resultar muy útil en el balanceo de ecuaciones redox:

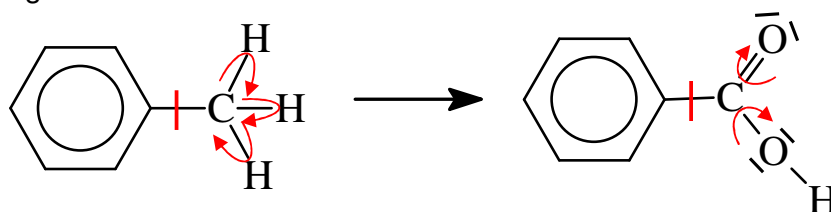
Empleando Formulas mínimas: la oxidación de tolueno a ácido benzoico se describe como:



Por lo que en **promedio** cada uno de los 7 átomos de carbono pierde 6/7 de electrón y la semi-reacción de oxidación se describe como:



Sin embargo al analizar las estructuras de Lewis:

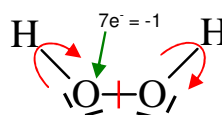
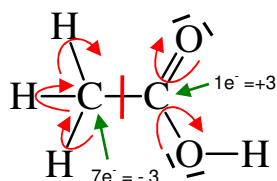


Es claro que sólo el carbono bencílico cambia de estado de oxidación de -3 en el tolueno a +3 en el ácido benzoico, perdiendo un total de 6 electrones.

A continuación se presentan algunas estructuras de Lewis que permiten esclarecer los estados de oxidación "extraños" que obtenemos a partir de las fórmulas mínimas, también se presentan las estructuras de algunas sustancias elementales que permiten entender porqué se les "asigna" un estado de oxidación de cero:

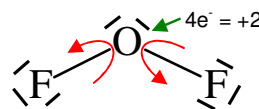
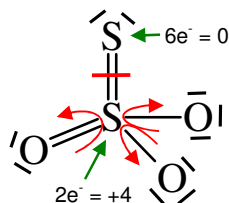
Ácido acético: $C_2H_4O_2$: $C = ?$

Peróxido de hidrógeno: H_2O_2 : $O = -1$?



Tiosulfato $S_2O_3^{2-}$: $S = +2$?

Difluoruro de oxígeno OF_2 : $O = +2$?



Nitrógeno elemental N_2 : $N = 0$

Azufre elemental S_8 : $S = 0$

