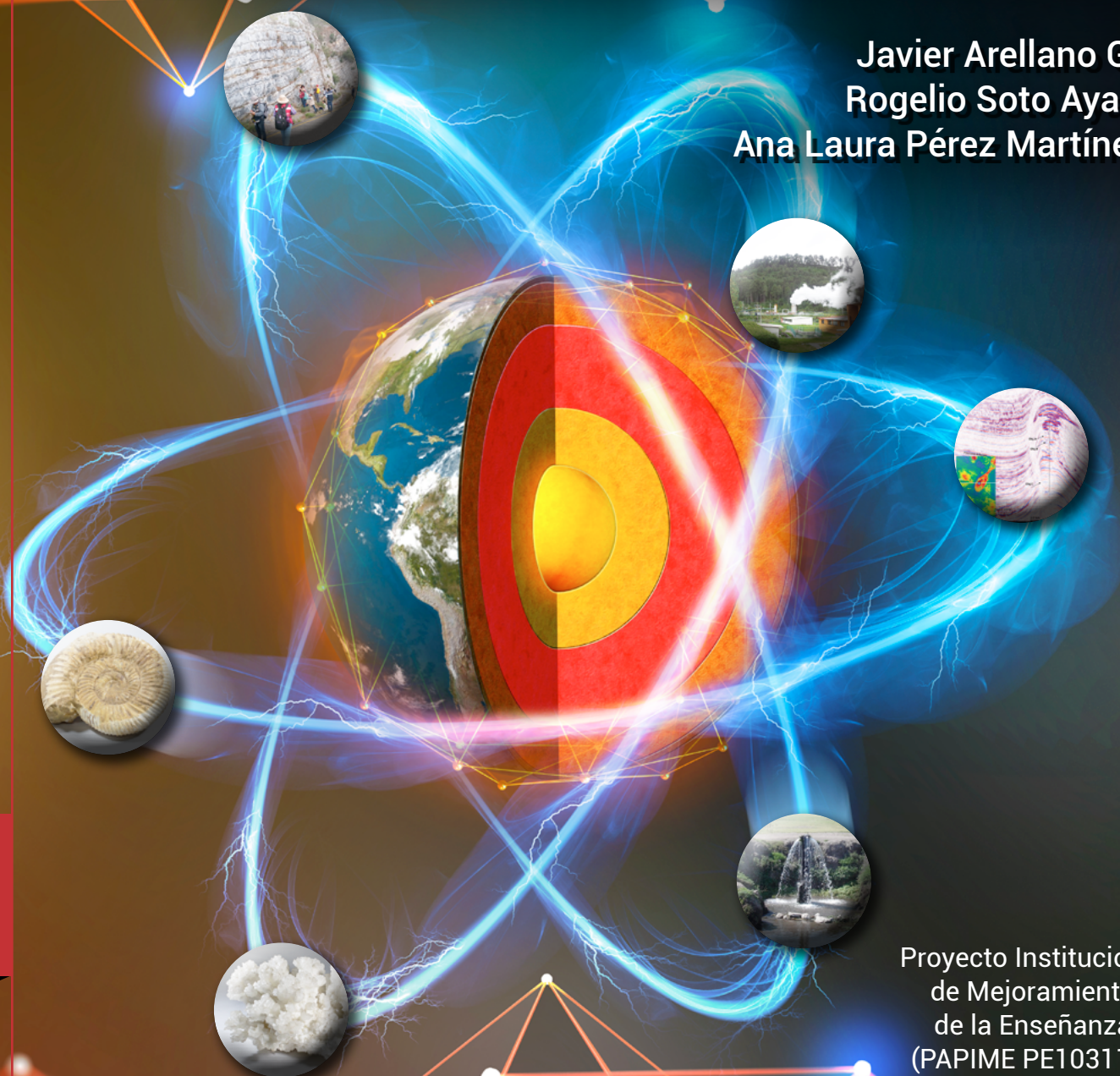


# QUÍMICA para ciencias de la Tierra: Fundamentos y aplicaciones

Javier Arellano Gil  
Rogelio Soto Ayala  
Ana Laura Pérez Martínez



Proyecto Institucional  
de Mejoramiento  
de la Enseñanza  
(PAPIME PE103116)



Para visualizar la obra  
te sugerimos

Acrobat Reader  
Haz Click

## **QUIMICA PARA CIENCIAS DE LA TIERRA: FUNDAMENTOS Y APLICACIONES**

ARELLANO GIL Javier, SOTO AYALA Rogelio, PÉREZ MARTÍNEZ Ana Laura  
Universidad Nacional Autónoma de México  
Facultad de Ingeniería  
2022, 551 págs.  
ISBN 978-607-30-6994-6

---

## **QUIMICA PARA CIENCIAS DE LA TIERRA: FUNDAMENTOS Y APLICACIONES**

Primera edición electrónica de un ejemplar (58 MB) en formato PDF  
Publicado en línea: en diciembre de 2022

D.R. © 2022, UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
Avenida Universidad núm. 3000, Col. Universidad Nacional Autónoma  
de México, Ciudad Universitaria, Alcaldía Coyoacán,  
México, Ciudad de México, Código Postal 04510.

FACULTAD DE INGENIERÍA  
<http://www.ingenieria.unam.mx/>  
ISBN 978-607-30-6994-6

Esta edición y sus características son propiedad de la Universidad Nacional  
Autónoma de México. Prohibida la reproducción o transmisión total o parcial  
por cualquier medio sin la autorización escrita del titular  
de los derechos patrimoniales.

Hecho en México.

---

### **UNIDAD DE APOYO EDITORIAL**

Cuidado de la edición: Ana Laura Pérez Martínez, Javier Arellano Gil y Rogelio Soto Ayala  
Diseño y formación editorial: Fanny Barragán Gasca y Mitzy Josefina López López  
Formato digital y diseño de portada: Luis Enrique Vite Rangel







# Índice de autores por capítulo

## Introducción

Javier Arellano Gil, Rogelio Soto Ayala, Ana Laura Pérez Martínez

## Capítulo 1. *La Química como Ciencia Básica*

Javier Arellano Gil, Ricardo Alfaro Fuentes, Rogelio Soto Ayala, Ana Laura Pérez Martínez, Carlos Manuel Toscano Morales

## Capítulo 2. *Estructura Atómica*

Rogelio Soto Ayala, José Luis Arcos Hernández, Carlos Armando Castillo Jon

## Capítulo 3. *Periodicidad*

Gerardo Barón Sánchez, Israel Alfaro Fuentes, Ricardo Alfaro Fuentes

## Capítulo 4. *Enlaces químicos y fuerzas intermoleculares*

Ana Laura Pérez Martínez, Mitzy Josefina López López, Noé Santillán Piña

## Capítulo 5. *Teoría de Orbitales Moleculares y Cristalografía*

Ana Paulina Gómora Figueroa, Diego Solís Ibarra, Gerardo Barón Sánchez

## Capítulo 6. *Estequiometría*

Ana Laura Pérez Martínez, Maricela Robles Cruz, Nitzia Ceballos Servin, Rogelio Soto Ayala, Noé Santillán Piña

## Capítulo 7. *Termoquímica y Equilibrio Químico*

Antonia del Carmen Pérez León, Hermelinda Concepción Sánchez Tlaxqueño, Francisco Laguardia Reyes

## Capítulo 8. *Electroquímica*

Ana Laura Pérez Martínez, Wladimir Guevara González

## Capítulo 9. *Química Orgánica*

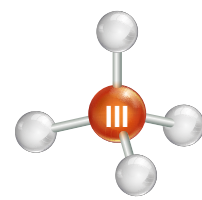
Ricardo Alfaro Fuentes, Javier Arellano Gil, Marco Antonio Rubio Ramos, Carlos Manuel Toscano Morales, Basilio Eslava Soto, Luisa Adriana Tortolero Camacho, Yisel Anaid Animas Gómez

## Capítulo 10. *Comportamiento de sustancias y diagramas de fases*

Héctor Erick Gallardo Ferrera, Isaías Castro Armendáris, Ibrahim Gallardo Ferrera

## Capítulo 11. *La Química y los lodos de perforación*

Javier Arellano Gil, Ana Laura Pérez Martínez, Alan Sebastian Rivera Rodríguez, Raúl Rubí Villegas, Fanny Astrid Barragán Gasca





## Capítulo 12. *Química y Paleontología*

María Patricia Velasco de León, Elizabet Chacón Baca, Alejandra Guadalupe Gutiérrez Alejandro

## Capítulo 13. *Modelado hidrogeoquímico para predecir procesos de mezcla en acuíferos*

José Antonio Hernández Espriú, Berenice Zapata Norberto, Luis Velázquez Aguirre, Sergio Macías Medrano, Alonso Soberón Sainz Trápaga

## Capítulo 14. *Geoquímica en el drenaje ácido de mina: aplicación en un sistema de tratamiento con rocas calcáreas*

José Enrique Santos Jallath, Francisco Martín Romero, José Luz González Chávez, Alejandrina Castro Rodríguez

## Capítulo 15. *Análisis hidrogeoquímico en una localidad de Veracruz*

Alberto Arias Paz, Gabriel Salinas Calleros

## Capítulo 16. *La Química y la disolución de carbonatos*

Daniel López Aguirre, Gerardo Barón Sánchez, Sergio Berumen Campos

## Capítulo 17. *Petrología y Química*

Alfredo Victoria Morales, José Luis Arcos Hernández, Noé Santillán Piña, Yoalli Biani Hernández Marmolejo

## Capítulo 18. *Los Explosivos y la Química en la Ingeniería de Minas y Metalurgia*

Gabriel Ramírez Figueroa

## Capítulo 19. *Métodos Geofísicos y la Química de la Tierra*

Iza Canales García, Isabel Domínguez Trejo, Antonio de Jesús Mendoza Martínez

## Capítulo 20. *Química y recuperación de hidrocarburos*

Javier Arellano Gil, Ana Laura Pérez Martínez, Alan Sebastian Rivera Rodríguez, Mariel Brito Schulz, Paolo Gabriel Páez Orozco, Brenda Ramírez Terrones

## Capítulo 21. *La Geotermia como manifestación de la energía química*

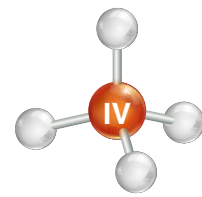
Gabriel Salinas Calleros

## Capítulo 22. *Diagramas de fase para sistemas silicatados*

Carlos Heinrich Schulze Schreiber

## Diseño y edición

Mitzy Josefina López López, Alan Sebastian Rivera Rodríguez, Fanny Astrid Barragán Gasca, Brenda Sofía Reyes Sainos







# PREFACIO

Javier Arellano Gil, Rogelio Soto Ayala y Ana Laura Pérez Martínez

La Química es una disciplina básica central que incide prácticamente en todas las áreas de la ciencia, por lo que es válido afirmar que sin su dominio nuestro estilo de vida se reduciría a un poco más que las condiciones primitivas que existieron hace mucho tiempo. El conocimiento de la Química ha sido de trascendental ayuda en la evolución de la humanidad y ha sustentado la posibilidad de conocer mejor los fenómenos de transformación de la materia que ocurren en la atmósfera, la hidrósfera, la litósfera y la biósfera, es decir, en todo el sistema Tierra, por lo tanto, tiene estrecha relación con la Ingeniería. No existe actividad desarrollada por el hombre en la cual no esté involucrado algún concepto relacionado con ella, razón por la que es estudiada desde la educación básica, continúa en el nivel medio superior, posteriormente, en el profesional y en los estudios de posgrado que están vinculados con la ingeniería.

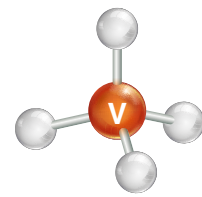
Es relevante que los estudiantes de Ingeniería en Ciencias de la Tierra reconozcan la importancia de la Química en su formación académica, en la sociedad y en su desarrollo profesional; que al egresar posean una formación más sólida y cuenten con los conocimientos, habilidades y herramientas necesarias para enfrentar y resolver con éxito cualquier eventualidad ligada con su praxis.

Al integrar esta obra, los autores consideraron que, en algunos cursos curriculares de Química, muchos alumnos de Ingeniería de las carreras de Ciencias de la Tierra perciben a la asignatura como un corpus abstracto, por ello fue estructurado un material que cuenta con información teórica fundamental sobre esta Ciencia Básica e incluye aplicaciones en proyectos de ingeniería para lograr, efectivamente, un aprendizaje significativo.

Asimismo, y a partir de su experiencia docente, los autores proclaman que para lograr un proceso enseñanza-aprendizaje eficaz en ciencias básicas, es necesario que exista motivación, la cual se consigue, entre otros factores, con la exposición, análisis y resolución de problemas o situaciones reales que pueden enfrentar los alumnos en la práctica profesional. El libro pretende entonces promover que los alumnos se interesen consciente y responsablemente en el estudio de la Química, que internalicen sus contenidos significativamente para que al egresar estén en aptitud de resolver problemas, poniendo en práctica sus conocimientos y eligiendo las mejores alternativas de solución.

Con tal pretensión, esta obra contiene ejemplos relacionados con la exploración, la explotación y el uso eficiente de recursos naturales, presentes en la corteza terrestre, particularmente los que tienen que ver con el agua, el petróleo, el gas natural y los minerales y sus propiedades físicas y químicas.

El libro *Química para Ciencias de la Tierra: Fundamentos y Aplicaciones* será así, un gran apoyo tanto para estudiantes como para profesores de Ciencias Básicas y de Ingeniería en Ciencias de la Tierra, ya que en sus unidades teóricas se desarrollan los conceptos fundamentales de Química y en los casos de aplicación y temas selectos, se muestran ejemplos y ejercicios correspondientes a problemas reales. El libro también servirá como fuente de consulta para ingenieros que se desempeñen en diferentes actividades profesionales de las Geociencias, quienes contarán con un libro de Química con teoría y aplicaciones, actualizado, en español, con información y ejemplos de México.



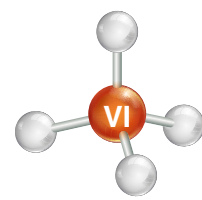


La Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), acorde con su misión de: “Generar recursos humanos en ingeniería con una formación integral de excelencia académica, con un sentido ecológico, ético y humanista, que los compromete a mantenerse actualizados permanentemente, capaces de resolver problemas de forma creativa e innovadora en el ámbito de su competencia, así como de realizar investigación científica y aplicada acorde a las necesidades de la sociedad y de impacto en el desarrollo nacional”, apoya la elaboración de libros como el presente y al mismo tiempo contribuye con sus publicaciones a la difusión del conocimiento y, como consecuencia, al desarrollo de México, manteniendo su posición de liderazgo en actividades académicas especializadas y en la formación de ingenieros altamente competitivos y demandados por los sectores productivos privados y del Estado, debido a que los egresados tienen un buen dominio de conocimientos, trabajan de manera colaborativa y se desempeñan con una alta responsabilidad social.

Considerando que la Dirección General de Publicaciones y Fomento Editorial de la UNAM tiene como objetivo “Promover la creación en los diferentes terrenos del arte y difundir las expresiones culturales y artísticas en todos sus géneros, así como los conocimientos científicos, tecnológicos y humanísticos que se desarrollan en la Universidad, para enriquecer la formación de los alumnos, beneficiar lo más ampliamente posible a toda la sociedad mexicana y fortalecer la identidad nacional”, un grupo de 33 académicos de la UNAM, la mayoría adscritos a la Facultad de Ingeniería, en las divisiones de Ciencias Básicas y de Ingeniería en Ciencias de la Tierra, especialistas en Química y en ingeniería aplicada se reunieron para elaborar de manera colegiada el Libro *Química para Ciencias de la Tierra: Fundamentos y Aplicaciones*. También participaron en su elaboración 22 alumnos que se titularon con el desarrollo de temas del libro, como servicio social o como becarios. El libro está constituido por diez capítulos de unidades teóricas y de doce capítulos con casos de aplicación y tópicos selectos de Química relacionados con las geociencias, que pretende cubrir una necesidad de material bibliográfico que permita fortalecer el aprendizaje de la Química en los estudiantes de las carreras de Ingeniería Geológica, Geofísica, Petrolera y de Minas y Metalurgista. Por su contenido y diseño, el libro está dirigido tanto a estudiantes de licenciatura como a profesores interesados en estas áreas del conocimiento.

El libro fue elaborado como parte del “Programa de Apoyo a Proyectos para la Innovación y Mejoramiento de la Enseñanza (PAPIME PE103116), con un temario base que cubre el contenido y los objetivos de la asignatura “Química de Ciencias de la Tierra”, de carácter obligatorio que se imparte en el primer semestre de las cuatro carreras de Ingeniería en Ciencias de la Tierra; además incluye otros temas complementarios que son relevantes para que los estudiantes tengan y mejoren su aprendizaje integral. Incluye también cuestionarios de autoevaluación y casos prácticos de ingeniería que, en su conjunto, constituyen un material didáctico motivante e interesante para los alumnos en el estudio de la Química Orgánica e Inorgánica.

En la edición de las reacciones químicas y la organización del contenido del texto se emplearon los programas de Chemdraw y Mendelej, con la finalidad de exponer de manera clara y sencilla los conceptos teóricos y prácticos experimentales concernientes a la materia.







## AGRADECIMIENTOS

Para elaborar un libro de utilidad en el mejoramiento de enseñanza de la ingeniería, se requiere de múltiples apoyos y del respaldo de instituciones educativas, que promuevan nuevas publicaciones y materiales didácticos novedosos, por lo que los autores y editores de esta obra, agradecemos a las siguientes instituciones y personas:

A la Universidad Nacional Autónoma de México y a sus autoridades por el apoyo institucional recibido.

A la Facultad de Ingeniería, de la Universidad Nacional Autónoma de México y a sus autoridades. Particularmente agradecemos y reconocemos el apoyo recibido del Dr. Gerardo René Espinosa Pérez, Jefe de la División de Ciencias Básicas, al Dr. Enrique Alejandro González Torres, Jefe de la División de Ingeniería en Ciencias de la Tierra y al M. I. Gerardo Ruiz Solorio, Secretario General.

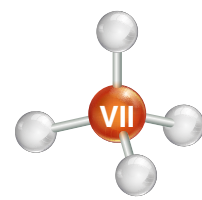
A la Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA), particularmente a las autoridades que coordinan el Programa de Apoyo para la Innovación y Mejoramiento de la Enseñanza (PAPIME) y al Comité Académico de las Ciencias Físico Matemáticas y de las Ingenierías, quienes nos apoyaron con los recursos para la realización del proyecto PAPIME (PE103116), cuyo objetivo principal fue la elaboración del presente libro.

A la Unidad de Apoyo Editorial de la Facultad de Ingeniería, UNAM, especialmente a la Lic. Patricia Eugenia García Naranjo, jefa de la Unidad de Apoyo Editorial, quien impulsa con mucho entusiasmo que se realicen publicaciones de utilidad para la comunidad universitaria. Nuestro reconocimiento al Ing. Gonzalo López de Haro†, ex secretario general de la Facultad y a la Mtra. María Cuairán Ruidíaz, por el apoyo brindado cuando se realizó la publicación de la obra en formato impreso.

Al Lic. Perfecto Arellano Gil, por la revisión y corrección de estilo, la que realizó de manera ágil y desinteresada, cuyas sugerencias fueron muy valiosas para mejorar la calidad de la obra, en cuanto a la redacción, la ortografía y el uso correcto del lenguaje.

Al Lic. Luis Enrique Vite Rangel, por diseñar la portada del libro, por cambiar el formato para impresión a un formato de obra digital y por las contribuciones que permitieron mejorar la presentación del contenido de la obra, haciendo un documento de fácil acceso.

A los ingenieros Mitzy Josefina López López, Alán Sebastian Rivera Rodríguez y Fanny Astrid Barragán Gasca, por sus importantes contribuciones en la coordinación del diseño y digitalización del contenido del libro, además por su trabajo cuidadoso y las revisiones detalladas durante la captura de los materiales que componen la obra.





A los alumnos becarios del proyecto Carlos Toscano Morales y Julieta Mares López, encargados de digitalizar figuras y esquemas, además de capturar parte de los textos que conforman el libro.

A los exalumnos de la Facultad de Ingeniería de las Carreras de Ciencias de Tierra, que se titularon con la modalidad de elaboración de material didáctico en el marco del proyecto PAPIME (PE103116), cuyo contenido de los trabajos que se desarrollaron se utilizó parcialmente en algunos capítulos del libro. Estos exalumnos son: Carlos Castillo Jon, Carlos Manuel Toscano Morales, Isaías Castro Armendáriz, Raúl Rubí Villegas, Wladimir Guevara González, Basilio Eslava Soto, Alan Sebastian Rivera Rodríguez y Mitzy Josefina López López, Robles Cruz Maricela, Cevallos Servin Nitzia, Francisco Laguardia Reyes, Luisa Adriana Tortolero Camacho, Yisel Anaid Ánimas Gómez, Robles Cruz Marisela, Mariel Brito Schulz, Paolo Gabriel Páez Orozco y Brenda Ramírez Terrones.

A los alumnos de servicio social Flor Daniela Elizalde Ortiz, Luis Carlos Espinoza Salazar, Federico III Hernández Villa, Antonio de Jesús Mendoza Martínez, Juan Arody Pérez Largo, Jenny Ramírez Suárez y Brenda Sofía Reyes Sainos, quienes apoyaron a los autores en algunos capítulos del libro, realizando la captura de textos, la elaboración de tablas, gráficas y figuras.

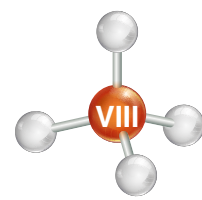
A la Dra. Ana Laura Pérez Martínez por la recopilación y edición del compendio de tablas, constantes e información general de química incluido en el apéndice A, "Manual de tablas para Química", de la presente obra.

A la Ing. Fanny Astrid Barragán Gasca que colaboró con la captura de las páginas legales y en la edición de la obra.

A la Mtra. Leticia Sánchez Guillén, por sus contribuciones que permitieron mejorar la versión final de la obra.

Al Ing. Gabriel Salinas Calleros por proporcionar dos fotografías que forman parte de la portada del libro.

Finalmente, agradecemos a aquellas personas que de forma directa o indirecta contribuyeron a que la elaboración de esta obra fuese una realidad en beneficio de la Comunidad Universitaria, particularmente para los alumnos y profesores de la Facultad de Ingeniería de la UNAM.







# INTRODUCCIÓN

Javier Arellano Gil, Rogelio Soto Ayala, Ana Laura Pérez Martínez

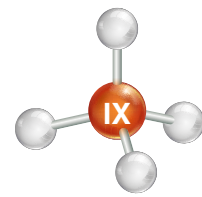
La Química, asignatura de Ciencias Básicas, es fundamental para comprender muchos de los fenómenos que ocurren a nuestro alrededor. Desde este punto de vista, no es exagerado afirmar que es ciencia central, ya que está relacionada con prácticamente todas las actividades humanas: generación de medicamentos más efectivos y con menores efectos colaterales, desarrollo de materiales más resistentes y más ligeros, circuitos integrados con dimensiones más pequeñas, pero con mayor capacidad de almacenamiento de información, etc., y qué decir del papel tan relevante que tiene en las Ciencias de la Tierra. Prueba de ello es, por ejemplo, la disciplina conocida como Geoquímica, que se enfoca en el estudio de los elementos químicos, así como en su migración y distribución en la litósfera, la hidrósfera, la biósfera y la atmósfera.

Los ingenieros en Ciencias de la Tierra deben contar con una formación sólida en Ciencias Básicas, no únicamente en física y en matemáticas, sino también en química, de manera que esta interdisciplinariedad les garantice un conocimiento profundo de los fenómenos del sistema Tierra, en aras de proponer mejores alternativas en los diferentes procesos que se llevan a cabo en él y que repercutan finalmente en un notable beneficio social.

Este libro intenta vincular los conceptos y la teoría de la química con ejemplos de campos de aplicación práctica, reforzando así la conexión entre ciencia e ingeniería. Se trata de los principios básicos de diversas ramas de la química, a saber, química física, química inorgánica, química orgánica, electroquímica y geoquímica, entre otras. Escrito principalmente para su uso como un libro de texto para un curso de nivel universitario, los temas cubiertos aquí proporcionan las herramientas fundamentales necesarias para que un ingeniero adquiera una formación más completa en el área de la química. La obra es resultado de un esfuerzo conjunto de treinta y tres académicos que tienen el propósito de contribuir en la mejora de la calidad de la enseñanza y el aprendizaje significativo de la asignatura “Química de Ciencias de la Tierra”, la que, junto con las demás asignaturas de Ciencias Básicas, son el sustento de los estudios de las diversas carreras de ingeniería que se imparten en la Facultad de Ingeniería de la UNAM.

“Química de Ciencias de la Tierra” es una asignatura obligatoria que se ofrece en el primer semestre dentro de la currícula de las carreras de Ingeniería Geológica, Geofísica, Petrolera y de Minas y Metalurgia, y tiene como objetivo que el alumno aplique los conceptos básicos para relacionar las propiedades de las sustancias en la resolución de ejercicios, desarrollando sus capacidades de observación y de manejo de instrumentos.

La Química es piedra angular dentro de la formación del Ingeniero, ya que, como ciencia básica, junto con las Matemáticas y la Física, contribuye a que los estudiantes desarrollen un pensamiento lógico, ordenado y estructurado, indispensable para la adecuada solución de problemas. Apoyados en el fundamento teórico, estudiantes y profesionales aplican metodologías que resuelven planteamientos que se estudian en materias curriculares posteriores y en la práctica profesional.

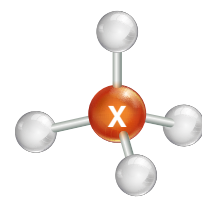




Actualmente, en el mercado internacional, existen muy pocos libros que muestren, de manera sencilla, la aplicación de la Química Orgánica e Inorgánica en la solución de problemas de Ciencias de la Tierra. Los existentes no son de fácil acceso en nuestro país y/o no cubren la totalidad de los temas del programa de la asignatura. En el mercado nacional no existen materiales publicados con estos contenidos, ya que no ha habido autores mexicanos que se hayan ocupado del asunto a pesar de su ingente necesidad por las múltiples aplicaciones que se pueden realizar y de la importancia que tiene la asignatura en todas las carreras de Ingeniería.

La mayoría de los libros de Química disponibles en el mercado no consideran en sus planteamientos teóricos y en sus ejercicios las diferentes aplicaciones en Ciencias de la Tierra, por lo que, para muchos estudiantes, su estudio resulta árido, de poco interés y desligado de su carrera. Es necesario, entonces, elaborar materiales bibliográficos que los motiven, que les resulten accesibles, no sólo físicamente, sino que también su contenido sea claro, con rigor científico y que contengan información con aplicaciones reales, como ocurre con los casos de estudio que han sido resueltos en la práctica profesional por especialistas en Química y en Geociencias.

Este material bibliográfico proveerá a los estudiantes de las herramientas necesarias para una formación profesional integral y de calidad, de modo que al egresar respondan con éxito a la demanda de recursos humanos altamente calificados que solicitan las empresas públicas y privadas, dedicadas a la exploración y explotación de recursos naturales. Académicos de la Facultad de Ingeniería elaboraron los objetivos, determinaron la metodología y estructuraron el contenido, para generar una obra ordenada y de calidad, que contiene teoría básica, aplicaciones, apoyos de gráficos, diagramas, dibujos, imágenes, casos de aplicación, temas selectos, ejercicios desarrollados y propuestos con la solución en un apéndice final, los cuales tienen como finalidad que el propio lector se pueda autoevaluar y retroalimentar. El libro pretende contribuir al fortalecimiento del proceso enseñanza-aprendizaje, acorde con los Planes y Programas de Estudio vigentes, mediante una reflexión profunda por parte de los estudiantes para que comprendan mejor los fenómenos químicos involucrados en los diferentes procesos, y lograr con esto aprendizajes realmente significativos.







## UNIDADES TEÓRICAS Y CONCEPTOS FUNDAMENTALES

### Capítulo 1

<b>La Química como Ciencia Básica</b> . . . . .	<b>3</b>
1.1 Introducción . . . . .	3
1.2 Definición y clasificación de la Química . . . . .	3
1.3 Importancia de la Química en la Sociedad . . . . .	4
1.4 Estado del arte de la Química inorgánica . . . . .	4
1.5 Estado del arte de la Química orgánica . . . . .	9
1.5.1 La Química orgánica en el desarrollo experimental . . . . .	11
1.5.2 Desarrollo de la Química orgánica durante la segunda mitad del siglo XIX y primera del siglo XX . . . . .	12
1.6 Autoevaluación . . . . .	13

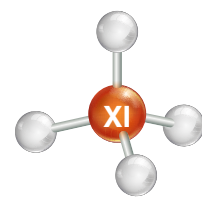
### Capítulo 2

<b>Estructura Atómica</b> . . . . .	<b>15</b>
2.1 Introducción . . . . .	15
2.2 Teoría atómica de la materia y la estructura del átomo . . . . .	15
2.2.1 John Dalton y el átomo . . . . .	15
2.2.2 Experimento de Thomson: naturaleza de los rayos catódicos . . . . .	16
2.2.3 Experimento de Millikan: carga eléctrica y masa del electrón . . . . .	17
2.2.4 Modelo atómico de Thomson . . . . .	17
2.3 La Radiactividad . . . . .	17
2.3.1 Wilhelm Röntgen: Rayos X . . . . .	17
2.3.2 Ernest Rutherford: Partículas alfa( $\alpha$ ), beta ( $\beta$ ) y gamma ( $\gamma$ ) . . . . .	18
2.3.3 Modelo atómico de Rutherford-Chadwick . . . . .	19
2.3.4 Estructura del átomo para el estudio de la Química . . . . .	19
2.3.5 Aplicaciones de la radiactividad en las Ciencias de la Tierra . . . . .	20
2.3.5.1 Registros geofísicos de pozos . . . . .	20
2.3.5.2 Registros de rayos gamma naturales . . . . .	21
2.3.5.3 Registro de neutrones . . . . .	21
2.4 Modelo atómico de la mecánica cuántica . . . . .	22
2.4.1 Propiedades de las ondas y la radiación electromagnética . . . . .	22
2.4.2 Max Planck: Teoría cuántica ondulatoria . . . . .	23
2.4.3 Albert Einstein: Efecto fotoeléctrico . . . . .	24
2.4.4 Niels Bohr: (Primer modelo cuántico del átomo de hidrógeno) . . . . .	26
2.4.5 Espectro electromagnético del átomo de hidrógeno . . . . .	28
2.4.6 Louis de Broglie: Naturaleza dual de la materia . . . . .	29
2.4.7 Principio de incertidumbre de Heisenberg . . . . .	30
2.4.8 Mecánica cuántica: números cuánticos y orbitales atómicos . . . . .	30
2.4.8.1 Número cuántico principal ( $n$ ) . . . . .	31
2.4.8.2 Número cuántico del momento angular orbital ( $l$ ) . . . . .	31
2.4.8.3 Número cuántico magnético ( $m_l$ ) . . . . .	31
2.4.8.4 Número cuántico del espín del electrón ( $m_s$ ) . . . . .	31

2.4.9 Principio de Exclusión de Wolfgang Pauli . . . . .	31
2.4.9.1 Orbitales atómicos del tipo "s" . . . . .	33
2.4.9.2 Orbitales atómicos del tipo "p" . . . . .	33
2.4.9.3 Orbitales atómicos del tipo "d" . . . . .	33
2.4.9.4 Orbitales atómicos del tipo "f" . . . . .	33
2.4.9.5 Distribución electrónica en los átomos . . . . .	34
2.4.10 Principio de máxima multiplicidad de Hund . . . . .	34
2.4.11 Excepciones de la configuración electrónica . . . . .	35
2.5 Propiedades magnéticas de las sustancias . . . . .	36
2.6 Aplicaciones de las propiedades magnéticas de las sustancias en las Ciencias de la Tierra . . . . .	37
2.6.1 Comportamiento magnético de la Tierra . . . . .	37
2.7 Autoevaluación . . . . .	39

### Capítulo 3

<b>Periodicidad</b> . . . . .	<b>45</b>
3.1. Introducción . . . . .	45
3.1.1 Historia . . . . .	45
3.1.2 Filosofía y ciencia . . . . .	45
3.1.3 Evolución de la tabla periódica . . . . .	46
3.1.4 Las triadas de Döbereiner . . . . .	47
3.1.5 La hélice telúrica de Chancourtois . . . . .	47
3.1.6 La ley de octavas de Newlands . . . . .	48
3.1.7 Meyer y Mendeleiev, la primera Tabla Periódica . . . . .	48
3.2 La tabla periódica en la actualidad . . . . .	50
3.2.1 Clases . . . . .	51
3.2.2 Periodos . . . . .	51
3.2.3 Familias . . . . .	51
3.2.4 Bloques . . . . .	52
3.3 Características generales de los elementos . . . . .	53
3.3.1 Metales . . . . .	53
3.3.2 No metales . . . . .	53
3.3.3 Metaloides . . . . .	54
3.3.4 Gases nobles . . . . .	54
3.4 Características químicas periódicas . . . . .	54
3.4.1 Número atómico . . . . .	54
3.4.2 Masa atómica . . . . .	55
3.4.3 Puntos de fusión y ebullición . . . . .	55
3.4.4 Carácter ácido-base . . . . .	55
3.4.5 Radio atómico, iónico y covalente . . . . .	56
3.4.6 Radio covalente . . . . .	57
3.4.7 Estructura cristalina . . . . .	57
3.4.8 Conductividad térmica . . . . .	57
3.4.9 Conductividad eléctrica . . . . .	57
3.5 Tendencias periódicas . . . . .	58
3.5.1 Electronegatividad . . . . .	58
3.5.2 Radio atómico . . . . .	59
3.5.3 Primera energía de ionización . . . . .	59
3.5.4 Afinidad electrónica . . . . .	60
3.6 Aplicaciones en Ciencias de la Tierra . . . . .	61
3.6.1 Aleaciones y metalurgia . . . . .	61
3.7 Autoevaluación . . . . .	64



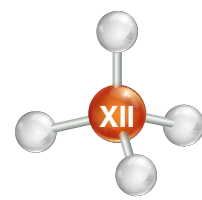
**Capítulo 4****Enlaces químicos y fuerzas intermoleculares. . . . . 69**

4.1	Introducción . . . . .	69
4.2	Teoría de Enlace Valencia (TEV). Enlaces covalentes: puro, polar y coordinado. Enlace iónico. . . . .	69
4.2.1	Enlaces químicos y tipos de enlace . . . . .	70
4.2.2	Enlace iónico . . . . .	70
4.2.3	Enlaces covalentes: puro, polar y coordinado . . . . .	72
4.2.4	Teoría del Enlace Valencia (TEV). . . . .	72
4.2.5	Polaridad de los enlaces covalentes. . . . .	73
4.2.5.1	Polaridad de las moléculas diatómicas . . . . .	73
4.2.5.2	Polaridad en moléculas poliatómicas . . . . .	74
4.2.6	Propiedades de las sustancias de acuerdo al tipo de enlace. . . . .	75
4.3	Fuerzas intermoleculares entre moléculas diatómicas . . . . .	76
4.3.1	Fuerzas intermoleculares. . . . .	76
4.3.2	Fuerzas electrostáticas ion-ion . . . . .	77
4.3.2.1	Fuerzas ion-dipolo. . . . .	78
4.3.3	Fuerzas de van der Waals . . . . .	78
4.3.3.1	Fuerzas dipolo-dipolo . . . . .	78
4.3.3.1.1	Puentes de hidrógeno . . . . .	79
4.3.3.2	Fuerzas de dispersión. . . . .	79
4.3.3.2.1	Fuerzas dipolo inducido-dipolo inducido . . . . .	79
4.3.3.2.2	Fuerzas ion-dipolo inducido . . . . .	79
4.3.3.2.3	Fuerzas dipolo-dipolo inducido . . . . .	80
4.4	Estructura de Lewis de moléculas sencillas. . . . .	80
4.4.1	Estructura de Lewis . . . . .	81
4.4.2	Regla del octeto. . . . .	81
4.4.2.1	Excepciones de la regla del octeto. . . . .	82
4.4.3	Reglas para escribir la estructura de Lewis . . . . .	82
4.4.4	Metodología algebraica para escribir la estructura de Lewis . . . . .	83
4.5	Teoría de Repulsión de los Pares Electrónicos de la Capa de Valencia (TRPECV) . . . . .	84
4.5.1	Interacciones repulsivas entre los pares de electrones en una molécula . . . . .	86
4.5.2	Reglas para determinar la geometría de una molécula, basadas en la TRPECV. . . . .	86
4.6	Geometría Molecular y polaridad con respecto a átomos centrales . . . . .	86
4.6.1	Moléculas polares y su influencia en la geometría molecular . . . . .	87
4.6.2	Geometría molecular . . . . .	88
4.6.3	Clasificación de las geometrías moleculares . . . . .	88
4.6.3.1	Geometría molecular lineal . . . . .	89
4.6.3.2	Geometría molecular trigonal (triangular) . . . . .	89
4.6.3.3	Geometría molecular tetraédrica. . . . .	90
4.6.3.4	Geometría molecular bipiramidal trigonal . . . . .	93
4.6.3.5	Geometría molecular octaédrica. . . . .	95
4.7	Fases: sólida, líquida y gaseosa. Fenómenos de superficie: tensión superficial, capilaridad . . . . .	97
4.7.1	Fase sólida. . . . .	97
4.7.2	Fase líquida . . . . .	97
4.7.3	Fase gaseosa. . . . .	98
4.7.4	Teoría cinético-molecular. . . . .	98
4.7.4.1	Fusión . . . . .	98
4.7.4.2	Evaporación. . . . .	99
4.7.4.3	Sublimación. . . . .	99
4.7.4.4	Condensación . . . . .	99

4.7.4.5	Solidificación . . . . .	99
4.7.5	Fenómenos de superficie: tensión superficial y capilaridad. . . . .	99
4.7.5.1	Tensión superficial. . . . .	100
4.7.5.2	Capilaridad . . . . .	100
4.8	Disoluciones: diluidas, saturadas y sobresaturadas. Disoluciones verdaderas. Suspensiones y Coloides . . . . .	101
4.8.1	Dispersiones . . . . .	101
4.8.2	Disoluciones. . . . .	102
4.8.3	Proceso de disolución . . . . .	102
4.8.3.1	Espontaneidad del proceso de disolución. . . . .	102
4.8.3.2	Disolución de sólidos en líquidos . . . . .	103
4.8.3.3	Disolución de líquidos en líquidos (miscibilidad). . . . .	104
4.8.3.4	Disolución de gases en líquidos . . . . .	104
4.8.3.5	Velocidad de disolución . . . . .	104
4.8.3.6	Disoluciones diluidas. . . . .	105
4.8.3.7	Disoluciones saturadas y solubilidad . . . . .	105
4.8.3.8	Efecto de la temperatura en la solubilidad . . . . .	105
4.8.3.9	Efecto de presión en la solubilidad. . . . .	105
4.8.3.10	Disoluciones verdaderas. . . . .	106
4.8.4	Coloides. . . . .	106
4.8.4.1	Coloides hidrofílicos e hidrofóbicos . . . . .	106
4.8.4.2	Eliminación de partículas coloidales . . . . .	107
4.8.5	Suspensiones. . . . .	107
4.9	Conductividad eléctrica de materiales iónicos en disolución . . . . .	107
4.9.1	Conducción eléctrica. . . . .	107
4.9.2	Conductividad específica $\kappa$ . . . . .	108
4.9.3	Conductividad molar $\Lambda$ . . . . .	109
4.10	Aplicaciones en Ciencias de la Tierra . . . . .	109
4.10.1	Enlaces químicos en Ciencias de la Tierra . . . . .	109
4.10.2	Fuerzas intermoleculares en Ciencias de la Tierra. . . . .	110
4.10.2.1	Fuerzas de van der Waals. . . . .	110
4.11	Autoevaluación . . . . .	111

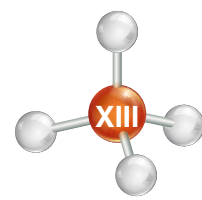
**Capítulo 5****Teoría de orbitales moleculares y cristalografía . . . . . 121**

5.1	Introducción . . . . .	121
5.2	Teoría de orbitales moleculares para moléculas diatómicas. . . . .	121
5.2.1	Orbitales moleculares . . . . .	121
5.2.2	Funciones de onda y orbitales atómicos. . . . .	122
5.2.3	Orbitales moleculares . . . . .	123
5.2.4	Configuración de orbitales moleculares . . . . .	124
5.2.5	Moléculas diatómicas . . . . .	124
5.2.5.1	Moléculas diatómicas homonucleares del primer periodo. . . . .	125
5.2.5.2	Moléculas diatómicas homonucleares del segundo periodo. . . . .	126
5.2.5.3	Moléculas diatómicas heteronucleares . . . . .	127
5.3	Enlace metálico . . . . .	130
5.3.1	Definición de metal . . . . .	130
5.3.2	Cristales metálicos y empaquetamiento de esferas . . . . .	131
5.3.3	Esquema de Arkel-Ketelaar. . . . .	132





5.3.4 Modelo de mar de electrones . . . . .	133	6.7.2 Porcentaje masa/masa (% m/m) . . . . .	176
5.3.5 Modelo de esfera suave . . . . .	134	6.7.3 Porcentaje masa/volumen (%m/v) . . . . .	177
5.4 Teoría de bandas . . . . .	135	6.7.4 Porcentaje volumen/volumen (%v/v) . . . . .	177
5.4.1 Estructura de bandas de metales . . . . .	137	6.7.5 Fracción molar . . . . .	178
5.4.2 Estructura de bandas de aislantes y semiconductores. . . . .	137	6.7.6 Partes por millón (ppm) . . . . .	178
5.5 Aislantes, semiconductores, conductores y superconductores . . . . .	138	6.8 Autoevaluación . . . . .	181
5.5.1 Aislantes. . . . .	138	<b>Capítulo 7</b>	
5.5.2 Semiconductores. . . . .	138	<b>Termoquímica y Equilibrio Químico . . . . .</b>	<b>187</b>
5.5.3 Superconductores. . . . .	141	7.1 Introducción . . . . .	187
5.6 Cristales: celdas unitarias y tipos de cristales . . . . .	143	7.2 Calor y entalpía de una reacción química. Determinación de la entalpía de una reacción. . . . .	187
5.6.1 La red. . . . .	143	7.2.1 Calor. . . . .	187
5.6.2 Celda unitaria. . . . .	143	7.2.2 Entalpía . . . . .	188
5.6.3 Los siete sistemas cristalinos . . . . .	144	7.2.3 Calorimetría . . . . .	188
5.6.4 Las catorce redes de Bravais . . . . .	145	7.2.4 Entalpía estándar de formación y de reacción . . . . .	190
5.6.5 Empaquetamiento de esferas . . . . .	145	7.2.5 Determinación de la entalpía estándar de una reacción . . . . .	190
5.6.6 Empacamiento compacto . . . . .	146	7.3 Método indirecto o ley de Hess . . . . .	190
5.7 Autoevaluación . . . . .	148	7.3.1 Calor de disolución y de dilución . . . . .	192
<b>Capítulo 6</b>		7.4 Constante de equilibrio de una reacción química . . . . .	193
<b>Estequiometría . . . . .</b>	<b>153</b>	7.4.1 Equilibrio químico . . . . .	193
6.1 Introducción . . . . .	153	7.4.2 Constante de equilibrio . . . . .	194
6.2 Conceptos de mol y masa molar . . . . .	153	7.4.3 Variación de $K_c$ con la forma de la ecuación balanceada. . . . .	196
6.2.1 Concepto de mol . . . . .	153	7.4.4 Usos de la constante de equilibrio, $K_c$ . . . . .	196
6.2.2 Concepto de masa molar . . . . .	154	7.4.5 Equilibrio en reacciones en fase gaseosa. Constante de equilibrio $K_p$ . . . . .	197
6.3 Relaciones estequiométricas: relación en entidades fundamentales, relación molar y relación en masa . . . . .	155	7.4.6 Relación entre $K_p$ y $K_c$ . . . . .	198
6.3.1 Relación en entidades fundamentales . . . . .	157	7.5 Principio de Le Châtelier . . . . .	198
6.3.2 Relación molar . . . . .	158	Efecto sobre el equilibrio de un cambio de concentración . . . . .	198
6.3.3 Relación en masa . . . . .	158	Efecto sobre el equilibrio de un cambio de presión o de volumen . . . . .	198
6.4 Reacciones ácido-base y pH . . . . .	159	Efecto sobre el equilibrio de un cambio de temperatura . . . . .	199
6.4.1 Ácidos . . . . .	160	7.6 Autoevaluación . . . . .	200
6.4.2 Bases. . . . .	162	<b>Capítulo 8</b>	
6.4.3 Ácidos y bases fuertes . . . . .	163	<b>Electroquímica . . . . .</b>	<b>207</b>
6.4.4 Reacciones de neutralización . . . . .	164	8.1 Introducción . . . . .	207
6.4.5 Escala de pH . . . . .	166	8.2 La electricidad y las reacciones óxido reducción espontáneas y no espontáneas . . . . .	207
Disoluciones neutras . . . . .	166	8.2.1 La electricidad . . . . .	207
Disoluciones ácidas. . . . .	166	8.2.2 Reacciones óxido-reducción. . . . .	208
Disoluciones básicas. . . . .	167	8.3 Potencial estándar de reducción. Serie de actividad . . . . .	210
6.5 Cálculos estequiométricos: reactivos limitantes y en exceso, rendimientos teórico, experimental y porcentual . . . . .	168	8.3.1 Potencial estándar de reducción. . . . .	210
6.5.1 Métodos de balanceo de ecuaciones químicas. . . . .	168	8.3.2 Serie de actividad . . . . .	213
Método por tanteo . . . . .	168	8.3.3 Balance de ecuaciones por cambio en el número de oxidación . . . . .	214
Método algebraico . . . . .	169	8.4 Pilas voltaicas. Reacción iónica total. Potencial de pila. Diagrama de la pila . . . . .	218
6.5.2 Reactivos limitantes y en exceso. . . . .	170	8.4.1 Pilas voltaicas . . . . .	218
Reactivo limitante. . . . .	170	8.4.1.1 Predicción de una reacción óxido-reducción. . . . .	218
Reactivo en exceso . . . . .	170	Energía libre de Gibbs (G) . . . . .	218
Rendimiento porcentual. . . . .	171	La pila de Daniell o celda de Daniell. . . . .	219
Rendimiento teórico . . . . .	171	8.4.2 Reacción iónica total . . . . .	220
Rendimiento real o experimental . . . . .	172		
6.6 La fase gaseosa y la ecuación del gas ideal . . . . .	173		
Ley de Boyle . . . . .	174		
Ley de Charles . . . . .	174		
Ley de Avogadro . . . . .	175		
6.7 Unidades de concentración . . . . .	176		
6.7.1 Molaridad o concentración molar . . . . .	176		







8.4.3 Potencial de pila . . . . .	221	9.6.3.2 Uso de los éteres en Ciencias de la Tierra. . . . .	259
8.4.4 Diagrama de la pila . . . . .	224	9.6.4 Aldehídos . . . . .	259
8.5 Celdas electrolíticas: Leyes de Faraday. Galvanización. Electrodeposición . . . . .	226	9.6.4.1 Nomenclatura . . . . .	259
8.5.1 Celdas electrolíticas: Leyes de Faraday . . . . .	226	9.6.4.2 Usos de los aldehídos en Ciencias de la Tierra. . . . .	260
8.5.1.1 Primera Ley de Faraday . . . . .	227	9.6.5 Cetonas . . . . .	260
8.5.1.2 Segunda Ley de Faraday . . . . .	227	9.6.5.1 Nomenclatura . . . . .	260
8.5.2 Galvanización . . . . .	230	9.6.5.2 Usos de las cetonas en Ciencias de la Tierra. . . . .	261
8.5.3 Electrodeposición . . . . .	231	9.6.6 Ácidos Carboxílicos . . . . .	261
8.6 Corrosión. Inhibidores. Protección catódica . . . . .	233	9.6.6.1 Nomenclatura . . . . .	262
8.6.1 Corrosión . . . . .	233	9.6.6.2 Usos de los ácidos carboxílicos en Ciencias de la Tierra. . . . .	262
8.6.2 Inhibidores . . . . .	234	9.6.7 Ésteres . . . . .	262
8.6.3 Protección catódica . . . . .	234	9.6.7.1 Nomenclatura . . . . .	263
8.7 Aplicaciones de electroquímica para Minas y Metalurgia . . . . .	236	9.6.7.2 Usos de los ésteres en Ciencias de la Tierra. . . . .	263
8.8 Autoevaluación . . . . .	237	9.6.8 Aminas . . . . .	264
		9.6.8.1 Nomenclatura . . . . .	264
		9.6.8.2 Usos de las aminas en Ciencias de la Tierra. . . . .	264
		9.6.9 Amidas . . . . .	265
		9.6.9.1 Nomenclatura . . . . .	265
		9.6.9.2 Usos de las amidas en Ciencias de la Tierra. . . . .	265
		9.6.10 Grupos funcionales del azufre, tioles, tioéteres, sulfóxidos y sulfonas . . . . .	265
		9.6.10.1 Nomenclatura . . . . .	266
		9.6.10.2 Uso de los compuestos de azufre en Ciencias de la Tierra. . . . .	266
		9.6.11 Halogenuros de alquilo . . . . .	266
		9.6.11.1 Nomenclatura . . . . .	266
		9.6.11.2 Usos de los compuestos de halogenuros de alquilo en Ciencias de la Tierra . . . . .	266
		9.7 Reacciones de adición y eliminación . . . . .	266
		9.7.1 Reacciones de adición . . . . .	267
		Adición de alquenos . . . . .	267
		Hydrogenación de alquinos . . . . .	267
		Adición de aminas a epóxidos . . . . .	267
		9.7.2 Reacciones de eliminación . . . . .	267
		Reacción de deshidrogenación. . . . .	267
		Deshidratación de alcoholes . . . . .	267
		9.8 Aplicaciones de química orgánica. . . . .	268
		9.8.1 Fraccionamiento de hidrocarburos saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos (S.A.R.A.) . . . . .	268
		9.8.1.1 Saturados . . . . .	268
		9.8.1.2 Aromáticos. . . . .	268
		9.8.1.3 Resinas . . . . .	268
		9.8.1.4 Asfaltenos . . . . .	269
		9.8.2 Métodos para realizar el análisis SARA. . . . .	269
		9.8.2.1 Cromatografía de capa fina con detección de ionización (TLC-FID) . . . . .	269
		9.8.2.2 Cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC, por sus siglas en inglés). . . . .	270
		9.8.2.3 Cromatografía por exclusión de tamaño (SEC) . . . . .	270
		9.8.3 Análisis del petróleo por cromatografía de gases . . . . .	270
		9.8.3.1 Clasificación de métodos cromatográficos. . . . .	271
		9.8.3.2 Análisis cualitativo . . . . .	272

## Capítulo 9

### Química Orgánica . . . . . 241

#### 9.1 Introducción . . . . . 241

#### 9.2 Hibridación del átomo de carbono en los compuestos orgánicos. . . . . 241

##### 9.2.1 Átomo de carbono y su hibridación. . . . . 241

##### 9.2.2 Hibridación sp<sup>3</sup> . . . . . 242

##### 9.2.3 Hibridación sp<sup>2</sup> . . . . . 243

##### 9.2.4 Hibridación sp . . . . . 243

##### 9.2.5 Enlaces tipo sigma y tipo pi. . . . . 244

#### 9.3 Alcanos . . . . . 245

##### 9.3.1 Nomenclatura. . . . . 245

##### 9.3.2 Tipos de estructuras . . . . . 246

##### 9.3.3 Tipos de carbono (de acuerdo con el número de carbonos enlazados). . . . . 247

##### 9.3.4 Representaciones de los hidrocarburos . . . . . 247

##### 9.3.5 Radicales hidrocarbonados. . . . . 247

##### 9.3.6 Reglas para la asignación de nombres en hidrocarburos de cadena larga y ramificada . . . . . 247

##### 9.3.7 Cicloalcanos . . . . . 249

#### 9.4 Alquenos. . . . . 250

##### 9.4.1 Nomenclatura. . . . . 250

##### 9.4.2 Alquenos ramificados o derivados . . . . . 251

##### 9.4.3 Estructura tridimensional . . . . . 252

##### 9.4.4 Isomería geométrica . . . . . 252

##### 9.4.5 Dienes y trienos . . . . . 252

###### 9.4.5.1 Dienes . . . . . 252

###### Dienes aislados o no conjugados. . . . . 252

###### Dienes conjugados. . . . . 253

###### 9.4.5.2 Trienos . . . . . 253

##### 9.4.6 Radicales de alquenos . . . . . 253

##### 9.4.7 Cicloalquenos . . . . . 253

#### 9.5 Alquinos . . . . . 254

##### 9.5.1 Nomenclatura. . . . . 254

##### 9.5.2 Estructura tridimensional . . . . . 255

#### 9.6 Principales grupos funcionales en la química orgánica, nomenclatura y propiedades . . . . . 255

##### 9.6.1 Clasificación de los grupos funcionales . . . . . 255

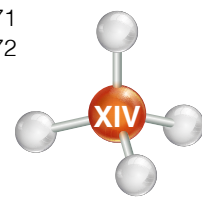
##### 9.6.2 Alcoholes (grupo hidroxilo) . . . . . 256

###### 9.6.2.1 Nomenclatura . . . . . 256

###### 9.6.2.2 Aplicaciones de los alcoholes en Ciencias de la Tierra. . . . . 258

##### 9.6.3 Éteres. . . . . 258

###### 9.6.3.1 Nomenclatura . . . . . 258





9.8.3.3 Análisis cuantitativo . . . . .	272
9.8.3.4 Ejemplos de cromatografía para crudos mexicanos . . . . .	273
9.8.3.5 Análisis experimental . . . . .	273
9.8.3.6 Distribución molar . . . . .	274
9.9 Autoevaluación . . . . .	275

**Capítulo 10**

<b>Comportamiento de sustancias y diagramas de fases. 281</b>	
10.1 Introducción . . . . .	281
10.2 Conceptos fundamentales . . . . .	281
10.3 Fases, componentes y estados de equilibrio de un sistema . . . . .	282
10.3.1 Estados de equilibrio en sistemas de un solo componente . . . . .	283
10.3.2 Estados de equilibrio en sistemas multicomponente . . . . .	284
10.3.3 La entropía en el comportamiento de fases de los sistemas . . . . .	285
10.4 Implicaciones para los diagramas de fase . . . . .	286
10.4.1 Sistemas de un solo componente . . . . .	286
10.4.2 Diagramas composicionales para sistemas multicomponente . . . . .	288
10.5 Problemas de equilibrio-líquido vapor . . . . .	290
10.6 Uso de ecuaciones de estado cúbicas en problemas de fases . . . . .	291
10.6.1 Sistemas puros . . . . .	292
10.6.2 Sistemas multicomponente . . . . .	294
10.7 Solución a problemas flash de un componente puro . . . . .	295
10.7.1 Método de sustituciones sucesivas . . . . .	295
10.7.2 Método de Newton-Raphson de una variable . . . . .	296
10.8 Solución a problemas flash en sistemas multicomponente . . . . .	297
10.8.1 Método de sustituciones sucesivas . . . . .	297
10.8.2 Método de Newton-Raphson . . . . .	298
10.9 Autoevaluación . . . . .	299

**CASOS DE APLICACIÓN Y  
TEMAS SELECTOS**

**Capítulo 11**

<b>La Química y los lodos de perforación . . . . .</b>	<b>303</b>
11.1 Introducción . . . . .	303
11.2 Importancia y utilidad de los lodos de perforación . . . . .	304
11.3 Teoría básica de las emulsiones . . . . .	304
11.4 Tipos de lodos de perforación . . . . .	305
11.4.1 Neumáticos . . . . .	305
11.4.2 Lodos base agua . . . . .	305
11.4.3 Lodos base aceite . . . . .	306
11.5 Fases de los lodos de perforación . . . . .	306
11.5.1 Fases de los lodos . . . . .	306
11.5.1.1 Fase continua de los lodos . . . . .	306
11.5.1.2 Fase discontinua de los lodos . . . . .	307
11.5.1.3 Fase sólida de los lodos . . . . .	307
11.6 Componentes de los lodos de perforación . . . . .	307
11.6.1 Arcillas . . . . .	307
11.6.2 Agentes densificantes . . . . .	308
11.6.3 Polímeros . . . . .	308
Polímero XC . . . . .	309
Celulosa drispac . . . . .	309
Carboximetil celulosa . . . . .	309

11.7 Propiedades químicas de los lodos . . . . .	309
11.7.1 pH y control de alcalinidad . . . . .	309
11.7.2 Alcalinidad . . . . .	310
11.7.3 Fuentes de alcalinidad . . . . .	310
11.8 Fluidos de perforación para realizar fracturamiento (fracking) y los apuntalantes (proppants) . . . . .	311
11.9 Conclusiones . . . . .	313

**Capítulo 12**

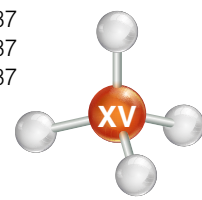
<b>Química y Paleontología . . . . .</b>	<b>315</b>
12.1 Introducción . . . . .	315
12.2 Biomineralización . . . . .	315
12.2.1 El proceso de biomineralización en eucariontes . . . . .	315
12.2.2 Esqueletos de calcita (aragonita, calcita magnésiana y calcita baja en magnesio) . . . . .	317
12.2.3 Algas . . . . .	318
12.2.4 Esqueletos de sílice: un ejemplo de ingeniería molecular . . . . .	318
12.2.5 Plantas . . . . .	319
12.3 Mineralización bacteriana . . . . .	319
12.4 Biomineralización y evolución . . . . .	320
12.5 Tendencias . . . . .	320
12.6 Conclusiones . . . . .	320

**Capítulo 13**

<b>Modelado hidrogeoquímico para predecir procesos de mezcla en acuíferos . . . . .</b>	<b>321</b>
13.1 Introducción . . . . .	321
La hidrogeoquímica . . . . .	321
La modelación hidrogeoquímica . . . . .	322
13.2 Métodos . . . . .	322
13.2.1 Área de estudio . . . . .	322
13.2.2 Caracterización hidrogeoquímica . . . . .	323
13.3 Modelado hidrogeoquímico . . . . .	323
13.3.1 Simulación de mezclas . . . . .	323
13.3.2 Simulación de índices de saturación . . . . .	324
13.4 Resultados y discusión . . . . .	324
13.4.1 Caracterización hidrogeoquímica y simulación de mezclas . . . . .	324
13.4.2 Índices de saturación simulados . . . . .	327
13.5 Conclusiones . . . . .	328

**Capítulo 14**

<b>Geoquímica en el drenaje ácido de mina: aplicación en un sistema de tratamiento con rocas calcáreas . . . . .</b>	<b>329</b>
14.1 Introducción . . . . .	330
14.2 Generación y neutralización del DAM . . . . .	330
14.2.1 Características del drenaje ácido . . . . .	330
14.2.2 Proceso de generación . . . . .	330
14.2.3 Neutralización del drenaje ácido . . . . .	331
14.3 Tratamiento del drenaje ácido . . . . .	332
14.3.1 Sistemas de tratamiento pasivo . . . . .	332
14.3.2 Tratamiento con rocas carbonatadas . . . . .	333
14.4 Procesos geoquímicos en la remoción de los elementos traza . . . . .	334
14.4.1 Movilidad de los elementos traza . . . . .	334
14.4.2 Precipitación de hierro y aluminio . . . . .	335
14.4.3 Sorción de elementos traza . . . . .	335
14.5 Caso de aplicación . . . . .	337
14.5.1 Sitio de estudio . . . . .	337
14.5.2 Objetivo . . . . .	337
14.5.3 Metodología . . . . .	337





14.6 Resultados y discusión . . . . .	338
14.6.1 Caracterización del DAM . . . . .	338
14.6.2 Caracterización de la roca . . . . .	338
14.6.3 Neutralización de DAM con las rocas . . . . .	339
14.6.4 Sedimentos formados en la neutralización. . . . .	340
14.7 Conclusiones . . . . .	342
14.8 Agradecimientos. . . . .	342

**Capítulo 15**

**Análisis Hidrogeoquímico en una localidad de Veracruz 343**

15.1 Introducción . . . . .	343
15.2 La calidad del agua . . . . .	343
15.2.1 Objetivo. . . . .	345
15.3 Conceptos hidrogeológicos fundamentales. . . . .	345
15.3.1 Hidrogeoquímica . . . . .	345
15.3.2 Agua subterránea. . . . .	345
15.3.3 Sustancias disueltas en el agua subterránea . . . . .	345
15.3.4 Análisis químico . . . . .	346
15.3.5 Representación gráfica de las características químicas y su utilidad. . . . .	346
15.3.6 Diagramas triangulares . . . . .	346
15.4 Caso de estudio . . . . .	347
15.4.1 Recopilación y análisis de la información . . . . .	347
15.4.2 Verificación geológica . . . . .	347
15.4.3 Censo de captaciones . . . . .	348
15.4.4 Sistema acuífero. . . . .	349
15.4.5 Profundidad y elevación del nivel estático. . . . .	349
15.4.6 Pruebas de bombeo . . . . .	351
15.4.7 Exploración geofísica . . . . .	351
15.4.8 Calidad del agua subterránea . . . . .	352
15.4.9 Coliformes fecales y coliformes totales . . . . .	352
15.4.10 Representación de la concentración iónica mediante diagramas . . . . .	354
15.5 Presentación de resultados . . . . .	355
15.6 Conclusiones . . . . .	356

**Capítulo 16**

**La Química y la disolución de carbonatos. . . . . 357**

16.1 Introducción . . . . .	357
16.2 Reacciones estequiométricas de los ácidos con minerales de rocas carbonatadas . . . . .	357
16.2.1 Reacción del ácido clorhídrico con calcita y dolomita (carbonatos) . . . . .	357
16.2.2 Reacción del ácido fluorhídrico con sílice (areniscas) . . . . .	357
16.2.3 Reacción del ácido fluorhídrico con arcillas o feldspatos (lutitas) . . . . .	358
16.2.4 Reacción del ácido fluorhídrico con calcita (carbonatos). . . . .	358
16.2.5 Reacción del ácido acético con calcita (carbonatos). . . . .	358
16.3 Caso práctico No. 1. Problema de disolución de rocas carbonatadas, utilizando análisis químico (estequiometría) . . . . .	359
16.4 Estimulación ácida (acidificación) . . . . .	361
16.4.1 Acidificación a la matriz de rocas carbonatadas . . . . .	361
16.4.2 Diseño de acidificación de la matriz de rocas carbonatadas . . . . .	361
16.5 Caso práctico No. 2. Problema de diseño de acidificación a carbonatos . . . . .	362
16.6 Conclusiones . . . . .	365

**Capítulo 17**

**Petrología y Química . . . . . 367**

17.1 Introducción . . . . .	367
17.2 Rocas ígneas . . . . .	367
17.2.1 Clasificación . . . . .	368
17.2.2 Composición química. . . . .	369
17.3 Rocas Sedimentarias . . . . .	370
17.3.1 Rocas sedimentarias químicas. . . . .	371
17.3.2 Ambiente de formación . . . . .	372
17.3.3 Carbonatos terrestres. . . . .	372
17.3.4 Rocas sedimentarias clásticas . . . . .	372
17.3.5 Clasificación . . . . .	373
17.3.6 Ambiente de formación . . . . .	374
17.4 Rocas metamórficas. . . . .	374
17.4.1 Tipos de metamorfismo . . . . .	374
17.4.2 Estructuras . . . . .	374
17.4.3 Facies metamórficas. . . . .	375
17.4.4 Ambiente de formación . . . . .	377
17.5 Distribución de las rocas en la República Mexicana 377	
17.5.1 Distribución de rocas ígneas . . . . .	377
17.5.1.1 Rocas vulcano-sedimentarias del Fanerozoico. . . . .	377
17.5.1.2 Rocas volcánicas del Mesozoico . . . . .	377
17.5.1.3 Rocas vulcano-sedimentarias del Terciario . . . . .	378
17.5.1.4 La Sierra Madre Occidental (SMO) o Franja Ignimbrítica Mexicana. . . . .	378
17.5.1.5 Franja Volcánica Transmexicana (FVT) 378	
17.5.1.6 Arco Volcánico Chiapaneco . . . . .	379
17.5.2 Distribución de las rocas metamórficas . . . . .	379
17.5.2.1 Rocas metamórficas del Precámbrico 379	
Complejo Bamori . . . . .	379
Complejo Oaxaqueño. . . . .	380
Otros afloramientos de rocas metamórficas precámbricas . . . . .	380
17.5.2.2 Rocas metamórficas del Paleozoico 381	
Complejo Acatlán . . . . .	381
Otros afloramientos de rocas metamórficas paleozoicas . . . . .	381
17.5.2.3 Rocas Metamórficas del Mesozoico 381	
Complejo Tierra Caliente . . . . .	381
Complejo Xolapa. . . . .	382
17.6 Conclusiones . . . . .	382

**Capítulo 18**

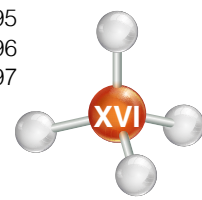
**Los explosivos y la Química en la Ingeniería de Minas y Metalurgia . . . . . 383**

18.1 Introducción . . . . .	383
18.2 Origen e historia de los explosivos. . . . .	385
18.3 Termoquímica y equilibrio químico. . . . .	386
18.4 Conclusiones . . . . .	387

**Capítulo 19**

**Métodos Geofísicos y la Química de la Tierra. . . . . 389**

19.1 Introducción . . . . .	389
19.2 Métodos potenciales . . . . .	389
19.2.1 Gravimetría . . . . .	389
19.2.2 Magnetometría . . . . .	391
19.3 Métodos indirectos . . . . .	393
19.3.1 Método sísmico. . . . .	393
19.3.2 Método eléctrico . . . . .	395
19.3.3 Método electromagnético. . . . .	396
19.4 Conclusiones . . . . .	397





**Capítulo 20**

**La Química y recuperación de hidrocarburos. . . . . 399**

20.1 Introducción . . . . . 399

20.2 Tipos de recuperación . . . . . 400

20.2.1 Recuperación primaria . . . . . 400

20.2.2 Recuperación secundaria . . . . . 401

20.2.3 Recuperación mejorada . . . . . 401

20.2.3.1 Procesos químicos . . . . . 402

20.2.3.1.1 Inyección mediante disoluciones alcalinas . . . 403

20.2.3.1.2 Inyección por surfactantes . . . . . 404

20.2.3.1.3 Inyección de polímeros . . . 405

20.2.3.1.4 Combinación de álcali-surfactante-polímero . . . 407

20.2.3.2 Procesos térmicos. . . . . 408

20.2.3.2.1 Inyección de aire o combustión in situ . . . . . 408

20.2.3.2.2 Inyección de agua caliente . . . 408

20.2.3.2.3 Inyección de vapor . . . . . 409

20.2.3.3 Procesos miscibles . . . . . 409

20.2.3.4 Procesos con uso de microorganismos . . . . . 409

20.2.4 Recuperación avanzada . . . . . 410

20.3 Conclusiones . . . . . 410

**Capítulo 21**

**La Geotermia como manifestación de Energía Química 411**

21.1 Introducción . . . . . 411

21.2 El calor de la Tierra . . . . . 412

21.3 El flujo de calor terrestre . . . . . 413

21.4 La propagación del calor de la Tierra . . . . . 413

21.5 Manifestaciones geotérmicas . . . . . 414

21.6 Recursos geotérmicos en explotación . . . . . 414

21.6.1 Campo Cerro Prieto . . . . . 415

21.6.2 Los Azufres . . . . . 415

21.6.3 Los Humeros . . . . . 416

21.6.4 Las Tres Vírgenes . . . . . 416

21.6.5 Cerritos Colorados . . . . . 416

21.7 Tipos de yacimientos geotérmicos . . . . . 417

21.7.1 Yacimiento geotérmico típico . . . . . 417

21.7.2 Yacimientos de muy baja temperatura . . . . . 418

21.7.3 Yacimientos de baja temperatura . . . . . 418

21.7.4 Yacimientos de temperatura media . . . . . 419

21.7.5 Yacimientos de alta temperatura . . . . . 419

21.7.5.1 Yacimientos de roca seca caliente . . . 421

21.7.5.2 Yacimientos geopresurizados . . . . . 421

21.8 Entalpía . . . . . 422

Entalpía de formación . . . . . 422

Entalpía de reacción . . . . . 422

Entalpía de combustión . . . . . 422

Entalpía estándar . . . . . 422

Entalpía de solidificación . . . . . 422

Entalpía de vaporización . . . . . 422

21.9 Clasificación de recursos geotérmicos . . . . . 422

21.10 Generación de electricidad de origen geotérmico . . . . . 424

21.11 Campos geotérmicos en México . . . . . 425

21.11.1 Recursos de roca seca caliente . . . . . 425

21.11.2 Recursos hidrotermales submarinos . . . . . 429

21.11.3 Reseña histórica de la geotermia como fuente alterna . . . . . 430

21.12 Impacto ambiental del uso de la geotermia . . . . . 432

21.13 Técnicas de exploración de los recursos geotérmicos . . . . . 434

21.13.1 Geológicas . . . . . 434

Imágenes de satélite . . . . . 434

Sistemas de posicionamiento global (GPS) . . . 434

Modelos digitales de elevación del terreno (MDE) . . . . . 435

Mapeadores térmicos . . . . . 435

Modelado geológico . . . . . 435

Modelado estructural . . . . . 435

Sistemas de información geográfica . . . . . 435

21.13.2 Geofísicas . . . . . 435

21.13.3 Geoquímicas . . . . . 436

Detección de elementos traza y gases del suelo . . . . . 436

Muestreo y análisis químico de agua y gases . . . . . 436

Muestreo y análisis isotópico de agua y gases . . . . . 436

Interpretación de los resultados y diagramas geoquímicos . . . . . 437

Geotermometría química e isotópica . . . . . 438

Geotermómetros basados en sílice disuelto . . . 438

Geotermómetros de cationes . . . . . 439

Geotermómetros de gases . . . . . 439

Geotermómetros Giggerbach . . . . . 440

Geotermómetros isotópicos . . . . . 440

Técnicas termométricas . . . . . 440

Medición de gradiente y flujo térmico en pozos . . . . . 441

Determinación de la descarga natural de calor . . . . . 442

21.14 Nuevas tecnologías en exploración geotérmica . . . 442

21.15 Programa general de exploración geotérmica . . . 443

21.16 Conclusiones . . . . . 444

**Capítulo 22**

**Diagramas de fase para sistemas silicatados . . . . . 445**

22.1 Introducción . . . . . 445

22.2 Generalidades . . . . . 445

22.3 Sistemas de un componente . . . . . 447

22.3.1 La regla de las fases . . . . . 447

22.3.2 Sistema H<sub>2</sub>O . . . . . 448

22.3.3 Sistema SiO<sub>2</sub> . . . . . 449

22.4 Sistemas con dos componentes . . . . . 449

22.4.1 Solución sólida (SS) . . . . . 449

22.4.2 Regla de la palanca o de lever . . . . . 450

22.4.3 Diagrama binario un eutéctico sin solución sólida . . . . . 451

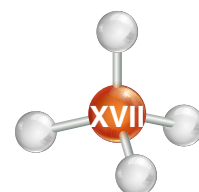
22.4.4 Sistema binario con solución sólida (SS) completa . . . . . 453

22.4.5 Diagrama de las plagioclasas . . . . . 454

22.4.6 Diagrama albíta-feldespato potásico . . . . . 456

22.4.7 Diagrama binario con un punto peritético: fusión o cristalización incongruente . . . . . 457

22.4.8 Diagrama binario cuarzo-leucita . . . . . 457







22.5 Sistema de tres componentes . . . . . 459  
 22.5.1 Regla de la palanca aplicada a sistemas ternarios . . . . . 459  
 22.5.2 Diagrama forsterita-dióxido-pirope, un ejemplo de fusión del manto . . . . . 461  
 22.5.3 Diagrama dióxido-forsterita-SiO<sub>2</sub>. . . . . 463  
 22.5.4 Diagrama dióxido-anortita-albita, ejemplo simplificado de la cristalización de un basalto . . . . . 466  
 22.6 Conclusiones . . . . . 469

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS. . . . . 471

RESPUESTAS A LOS CUESTIONARIOS DE AUTOEVALUACIÓN. . . . . 479

**APÉNDICES**

**Apéndice A**

Manual de Tablas para química. . . . . 491  
 Sistema internacional de unidades y equivalencias . . . . . 491  
 Factores unitarios de conversión de unidades . . . . . 491  
 Múltiplos y submúltiplos de las unidades SI . . . . . 492  
 Constantes físicas . . . . . 492  
 Espectro electromagnético . . . . . 493  
 Longitudes de onda de la luz visible . . . . . 493  
 Colores complementarios . . . . . 493  
 Tabla periódica de los elementos . . . . . 494  
 Principio de Aufbau . . . . . 496  
 Forma de los orbitales . . . . . 497  
 Forma de moléculas predichas de acuerdo con la teoría de la repulsión de pares de electrones de valencia dirigida . . . . . 498  
 Niveles de energía de orbitales moleculares. . . . . 499  
 Estructuras cristalinas . . . . . 500  
 Características de estructuras cristalinas . . . . . 500  
 Tabla de iones monoatómicos más comunes . . . . . 501  
 Tabla de iones poliatómicos . . . . . 502  
 Constantes de disociación para ácidos (K<sub>a</sub>) . . . . . 503  
 Constantes de disociación para bases (K<sub>b</sub>) . . . . . 505  
 Constantes del producto de solubilidad (K<sub>PS</sub>) . . . . . 506  
 Potenciales estándares de reducción (E° a 298.15 K) . . . . . 509  
 Datos termodinámicos (ΔH<sub>f</sub>°, ΔG<sub>f</sub>° y S°) . . . . . 511

**Apéndice B**

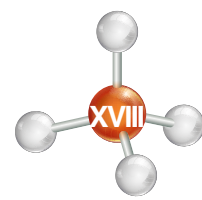
Clasificación de los fluidos petroleros de acuerdo con sus fases . . . . . 515  
 1. Aceite negro . . . . . 516  
 2. Aceite volátil . . . . . 516  
 3. Gas y condensado . . . . . 517  
 4. Gas húmedo . . . . . 517  
 5. Gas seco . . . . . 518  
 6. Análisis de la fracción de C<sub>7+</sub> en los fluidos del yacimiento . . . . . 518  
 7. Tabla B.1. Composición y propiedades típicas de los fluidos petroleros. . . . . 518

**Apéndice C**

Normatividad de la geotermia en México . . . . . 519  
 Aspectos legales de la geotermia en México . . . . . 519  
 Los recursos naturales en la Constitución Política de los Estados Unidos Mexicanos . . . . . 520  
 La reglamentación constitucional del subsuelo. . . . . 522  
 Régimen constitucional de las aguas del subsuelo. . . . . 522  
 Ley de energía geotérmica . . . . . 523  
 De los permisos de exploración. . . . . 524  
 Disposiciones aplicables a los permisos y concesiones . . . . . 524  
 De la terminación, revocación y caducidad de los permisos y de las concesiones . . . . . 524  
 De la información del subsuelo nacional. . . . . 525  
 Reglamento de la ley de energía geotérmica . . . . . 525  
 Capítulo I. Disposiciones generales. . . . . 525  
 NORMA Oficial Mexicana NOM-150-SEMARNAT-2006 . . . . . 526  
 Ley de aguas nacionales . . . . . 528  
 Reglamento de la ley de aguas nacionales . . . . . 529

**Apéndice D**

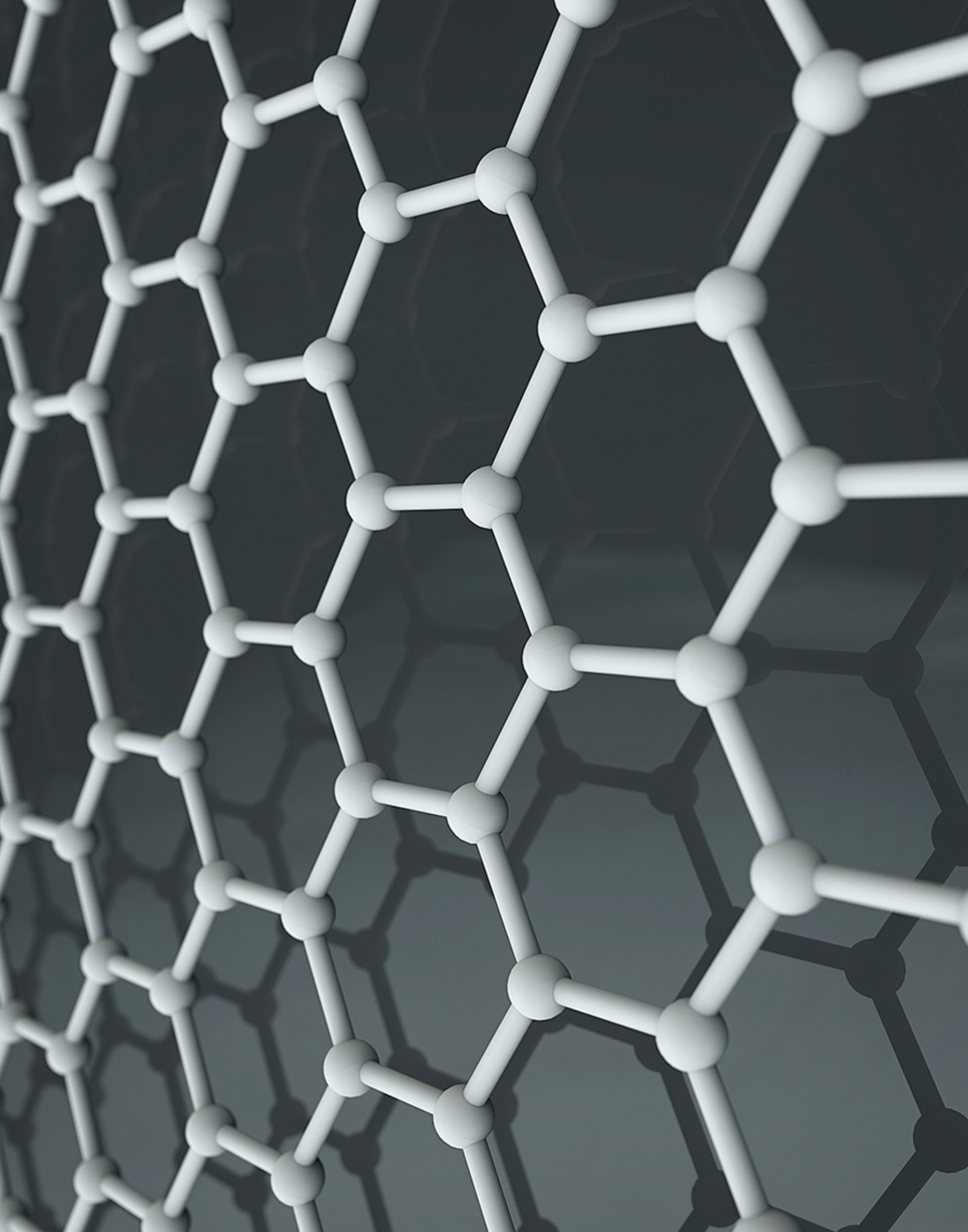
Diagramas de fase para sistemas silicatados . . . . . 531  
 D.I. Reglas de Goldschmidt y Ringwood. . . . . 531  
 D.II. Solución sólida binaria compleja y solución sólida compartida . . . . . 531  
 D.III. Sistema en tránsito . . . . . 532  
 D.IV. Abreviaciones . . . . . 532





UNIDADES  
TEÓRICAS Y  
CONCEPTOS  
FUNDAMENTALES







# Capítulo 1

## La Química como Ciencia Básica

Javier Arellano Gil, Ricardo Alfaro Fuentes, Rogelio Soto Ayala,  
Ana Laura Pérez Martínez, Carlos Manuel Toscano Morales

### 1.1 Introducción

Química, Física, Matemáticas y Geología, son Ciencias Básicas que integran un ineludible sustento para el aprendizaje en las carreras de Ingeniería en Ciencias de la Tierra. Sin embargo, siendo herramientas fundamentales, su estudio y comprensión resultan áridos por su nivel de abstracción y por la dificultad para mostrar aplicaciones en las áreas de interés de los estudiantes.

Estudiar Química constituye el antecedente de asignaturas posteriores como: Mineralogía, Geoquímica, Geoquímica orgánica, Geoquímica del Petróleo, Propiedades de los fluidos petroleros, Geología del Petróleo, etc.

La relación más estrecha entre la Química y las Ciencias de la Tierra se encuentra en la Geoquímica, disciplina encargada de estudiar todo lo relacionado con la procedencia, distribución y abundancia de los elementos químicos, particularmente los que se encuentran en la corteza terrestre (Litósfera), en el agua (Hidrosfera), en los organismos vivos y fósiles (Biosfera) y en el aire (Atmósfera).

### 1.2 Definición y clasificación de la Química

La química es la ciencia que estudia a la materia y a los cambios que ocurren en ella. Dichos cambios se refieren a los diversos procesos de interacción entre partículas o sustancias, así como al carácter energético que los acompaña.

Esta rama del conocimiento humano puede parecer compleja e intimidante, sin embargo, es asombrosa y constituye una excelente e ineluctable herramienta académica. A continuación, se describen algunos aspectos destacados que han contribuido a mejorar la comprensión del mundo químico.

1. La química, al igual que la física, es una ciencia que explora la estructura de la materia. Los componentes básicos de la materia son los átomos, que se unen para formar moléculas. Los átomos y las moléculas interactúan para formar nuevos compuestos a través de reacciones químicas.
2. Los químicos y otros científicos se han planteado preguntas sobre el comportamiento de la materia, las cuales han sido resueltas mediante la utilización del método científico,

#### Sumario

##### 1.1 Introducción

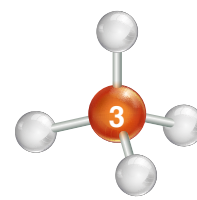
##### 1.2 Definición y Clasificación de la Química

##### 1.3 Importancia de la Química en la sociedad

##### 1.4 Estado del arte de la Química inorgánica

##### 1.5 Estado del arte de la Química orgánica

##### 1.6 Autoevaluación







- herramienta fundamental en el diseño de experimentos, en el análisis de datos, en la generación de conclusiones objetivas, etc.
3. Todo lo que se puede tocar, saborear u oler, está hecho de materia. La materia lo compone todo. Alternativamente, se podría decir que la materia está formada por átomos. La química estudia procesos donde hay ruptura y formación de nuevos enlaces.
  4. La investigación en química se puede enfocar bajo dos vertientes: la investigación teórica, que nos ayuda a entender cómo funcionan los compuestos, incrementa nuestro nivel de conocimiento y nos ayuda a hacer predicciones sobre determinados fenómenos; y el aspecto experimental o práctico, que permite, gracias al conocimiento teórico, desarrollar nuevos productos, mejorar los procesos y resolver diversos tipos de problemas.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

Dentro de la Química existe una gran cantidad de clasificaciones, las cuales día con día crecen y se diversifican. Algunas de las más destacadas son la Fisicoquímica, la Química Teórica, la Química Analítica, la Química Inorgánica y la Química Orgánica.

### 1.3 Importancia de la Química en la sociedad

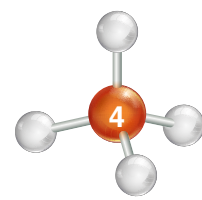
La Química está presente en muy diversas actividades desarrolladas por el ser humano. Por ejemplo, en el proceso de purificación o de potabilización del agua usada para el consumo humano y para el riego de plantaciones; en la mejora de la producción de alimentos utilizando abonos, fertilizantes e insecticidas; en la ganadería, donde se utilizan fármacos que permiten tener carne y productos lácteos de mejor calidad; en la síntesis y producción de nuevos medicamentos para combatir enfermedades como el cáncer (nos referimos al cis-platino  $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2(\text{Cl})_2]$ , que es un agente anticancerígeno muy potente).

Igualmente, conocer la Química de los hidrocarburos es muy importante para la industria y para la sociedad, ya que esas sustancias son la principal fuente de energía a nivel mundial y de las cuales se derivan miles de productos útiles.

Sin duda, también es importante señalar el carácter interdisciplinario y multidisciplinario que la Química mantiene con otras ciencias como la Biología, la Física, las Matemáticas, la Ciencia de los Materiales, la Medicina, y muchas ramas de la ingeniería: como la Ingeniería Geológica, la Ingeniería Geofísica, la Ingeniería Petrolera y la Ingeniería de Minas y Metalurgia.

Ejemplos de elementos importantes para la sociedad explorados y explotados por ingenieros en las Ciencias de la Tierra y utilizados para diferentes fines son: oro, plata, plomo, zinc, carbón, oxígeno, azufre, uranio, nitrógeno, hidrógeno y aluminio. No menos importantes son los compuestos o sustancias que se encuentran en forma natural en el medio ambiente, o bien, aquéllas que son consideradas como contaminantes al encontrarse en mayores concentraciones que las estimadas como normales, como el dióxido de carbono, el dióxido de azufre, la lluvia ácida, los hidrocarburos, los herbicidas, los plaguicidas, el ozono, etc.

Aplicando conjuntamente los contenidos de la Química y las Geociencias se pueden resolver problemas de contaminación ambiental y realizar investigaciones sobre la ocurrencia y localización de yacimientos minerales, yacimientos petroleros, yacimientos geotérmicos y acuíferos, recursos muy importantes para el desarrollo sostenible y de crecimiento económico para cualquier país.





## 1.4 Estado del arte de la Química Inorgánica

En sus inicios, la Química Inorgánica se caracterizó por el estudio de los compuestos provenientes de minerales y/o sales; esta concepción ha cambiado, ya que actualmente existen áreas transdisciplinarias, como la Bioinorgánica, la Organometálica, la Química de materiales cerámicos, entre otras.

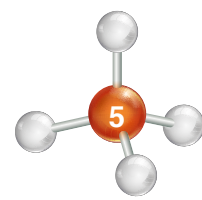
Desde la prehistoria, el hombre, sin darse cuenta, ya hacía uso de la Química. Por ejemplo, con el uso del fuego para cocinar, las proteínas sufrían transformaciones químicas que modificaron sus hábitos alimenticios. En su evolución, el hombre desarrolló técnicas que lo llevaron a emplear herramientas para cazar animales con materiales de mayor dureza y resistencia, como madera, piedras, huesos, etc. Esta época, conocida como Edad de Piedra, ocurrió, aproximadamente, 10,000 años a.C. El ser humano siguió descubriendo diversos materiales para su beneficio, como el cobre nativo, que fue el primer mineral en ser utilizado y explotado directamente de la mena, para la creación de ornamentos, utensilios y armas; sucedió así, la Edad del Cobre, aproximadamente, de 5200 a.C. a 4000 años a.C. Un posterior desarrollo fue el descubrimiento del bronce, aleación de cobre y estaño que presenta mayor dureza y resistencia que las herramientas o armas fabricadas con cobre; este cambio marcó el inicio de la Edad del Bronce, ocurrida del año 3000 al 2000 a.C., aproximadamente. El siguiente paso consistió en el descubrimiento del hierro, un mineral muy escaso, ya que inicialmente sólo era extraído de trozos de meteoritos. El hierro forjado tuvo su origen en el oriente de Asia Menor, alrededor del año 1500 a.C., donde los hititas utilizaron por primera vez el hierro para la producción de armas. En el año de 1280 a.C., durante la Edad del Hierro, hubo un auge en la utilización del hierro por los mismos hititas, quienes en esa misma región descubrieron la aleación del carbón vegetal con el hierro, formando así el acero.

Culturas posteriores formaron sus imperios a partir de la fabricación y uso de armas más resistentes y duraderas. Independientemente de esta práctica, el descubrimiento de otras sustancias o materiales fue lo que permitió que tanto los egipcios, como los griegos, por los años 900 a.C., crearan disciplinas o agrupaciones en cuyo trabajo o investigación emplearan la palabra "*khemeia*", la cuál es el antecedente del vocablo "*química*".

Una de las primeras personas enfocadas en el estudio de la materia y sus transformaciones fue **Tales de Mileto (~640-546 a.C.)**, fundador de la escuela Jónica en Mileto (Jonia) en lo que ahora es Turquía. Con base en sus estudios, concluyó que el elemento formador de todo era el agua: determinó que las sustancias provenían de ella y que, al descomponerse, se transformaban de nuevo en dicho elemento.

**Anaxímenes de Mileto (~590-524 a.C.)**, hacia el año 570 a.C., propuso que el aire era el elemento constitutivo del universo. Según él, este elemento formaba a las sustancias más densas, como el agua y la tierra. Otro griego, **Heráclito de Efeso (~540-475 a.C.)**, determinó que el fuego era el que presidía a todos los cambios de la materia, por lo que también planteó que era el elemento que forma al universo. En Sicilia, el discípulo de Pitágoras, **Empédocles de Agrigento (~490-430 a.C.)** reuniendo las diferentes corrientes filosóficas, propuso unir todos estos elementos, el agua, el aire y el fuego, anexando a la tierra como parte del origen de todo.

A la par de esta evolución del pensamiento, **Leucipo de Jonia (~450 a.C.)** y su discípulo **Demócrito de Abdera (~470-380 a.C.)** postularon que la materia está constituida por "átomos" término que significaba que las partículas habían sido divididas a un mínimo tamaño. Esta teoría no fue aceptada del todo: **Aristóteles (~384-322 a.C.)** pensaba que la idea de una partícula no divisible en otras más pequeñas era absurda, por lo cual la teoría del atomismo fue reclusa en el olvido. Tuvieron que pasar dos mil años para retomarla nuevamente.





Hacia el año 200 a.C., en una población cercana al delta del Nilo, el greco-egipcio **Bolos de Mendes**, fue el primer practicante de khomeia. Se dedicó a buscar un método para cambiar de un metal a otro, en especial de plomo a oro, procedimiento conocido como *transmutación*, después estudiado por los alquimistas.

En el siglo V de nuestra era, al fundarse Constantinopla, después de la caída del Imperio Romano, hubo una etapa de oscurantismo en la ciencia: la alquimia fue practicada durante cerca de dos mil años. Mientras que esto sucedía en el occidente, en el oriente los árabes siguieron avanzando científicamente. **Jabir ibn-Hayyan (~760-815 d.C.)** desarrolló técnicas de destilación, al separar el ácido acético del agua por la destilación del vinagre. Otro descubrimiento importantísimo fue el del ácido nítrico y el agua regia, mezcla de ácido clorhídrico y nítrico capaz de disolver el oro. Hacia finales del siglo XVI sólo se conocían trece elementos: cobre, oro, zinc, hierro, plata, mercurio, carbono, estaño, plomo, azufre, arsénico, bismuto y antimonio. En ese entonces los compuestos inorgánicos tenían un uso más bien religioso. Paulatinamente se fueron caracterizando y clasificando.

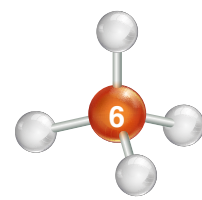
Entre los siglos XVI y XVII, a la par de los avances tecnológicos, la química prosperó al refutar muchas ideas medievales y antiguas, como la teoría de los cuatro elementos (agua, aire, fuego y tierra). Inició, entonces, la formalización del estudio de ciencias como la medicina y la metalurgia. Un ejemplo del progreso científico se encuentra en el primer libro sobre minería, metalurgia y química del mundo, el *De Re Metallica (Sobre la Metalurgia)* obra de **Georg Bauer (1494-1555)**, mejor conocido como "**Agrícola**", póstumamente publicado en 1556. Este alemán indagó y describió el arte de la minería, el refinado y la fundición de metales a través de imágenes muy bien elaboradas.

En el siglo XVIII era bien aceptada la teoría del *flogisto*, la cual trataba de explicar el proceso de combustión en materiales u objetos. Se creía que si un material ardía con facilidad era debido a la cantidad de flogisto que contenía, como el carbón mineral. En esa misma época, el belga **Juan Bautista Van Helmont (1577-1644)**, considerado el descubridor de los gases, los diferenció de los vapores en un estudio que realizó sobre la acción del ácido sobre los carbonatos, por la combustión de carbón o por fermentación de vino o cerveza (ácido acético). Observó diferentes gases, varios de ellos inflamables usados como combustibles. Los gases descubiertos fueron el gas carbónico (CO<sub>2</sub>), el anhídrido sulfuroso (H<sub>2</sub>S) y otro, producto de la disolución del hierro y zinc en ácido: el hidrógeno.

Una vez ya delineada, la Química Inorgánica, tuvo un gran desarrollo gracias al trabajo de científicos como **Antoine Laurent de Lavoisier (1743-1794)** "Padre de la química moderna", debido a su publicación en 1789 *Tratado elemental de Química*. Descubrió que el fenómeno de la combustión requiere de oxígeno y no del flogisto y enunció la *Ley de la conservación de la materia*. Sus aportaciones sirvieron de mucho en la industria del acero: descubrió experimentalmente que mientras más oxígeno se agrega a la reacción de combustión, más aumenta la temperatura. Este conocimiento se aplicó directamente en los altos hornos de la metalurgia.

Hacia 1800, ya eran conocidos veintiún elementos: fósforo, cobalto, platino, níquel, magnesio, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno, cloro, manganeso, bario, molibdeno, telurio, wolframio, estroncio, zirconio, uranio, titanio, itrio, cromo y berilio.

En esos mismos años, el físico italiano **Alessandro Volta (1745-1827)** inventó la batería eléctrica, hecho que facilitó el estudio de muchos compuestos químicos ya que por medio de la corriente eléctrica se pudieron separar elementos contenidos en las sustancias. El químico inglés **Humphry Davy (1778-1829)** aprovechó el invento de Volta para descubrir nuevos elementos por medio de la electrólisis. En 1807, separó el potasio de la potasa fundida (carbonato potásico), lo cual permitió





el descubrimiento de otros elementos: magnesio, bario, estroncio, calcio, sodio, boro, litio, calcio y cloro.

En 1808, **John Dalton (1766-1844)** publicó la primera teoría atómica en su libro *Nuevo sistema de filosofía química*, mientras que **Jöns Jacob Berzelius (1779-1848)**, en 1818, propuso que los elementos se representaran con letras en vez de símbolos, contribuyendo certeramente en la creación de la tabla periódica.

En 1801, **Andrés Manuel del Río (1764-1849)**, químico hispano-mexicano, descubrió en la Ciudad de México el vanadio, elemento que él nombró eritronio. Lamentablemente su descubrimiento fue disputado con el químico sueco **Nils Gabriel Sefström (1787-1845)** quien aisló el mismo elemento. A este científico se atribuye el descubrimiento del vanadio.

En 1831, el británico **Peregrine Phillips (1800-1888)** patentó la producción de ácido sulfúrico por el método de cámaras de plomo a partir del tostamiento de pirita. El ácido sulfúrico fomentó el crecimiento de la industria de los fertilizantes en Inglaterra en 1843, ya que ayudó a la producción de fertilizantes nitrogenados, como el sulfato de amonio, o fertilizantes de fosfato, como el superfosfato de calcio  $\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$ ; también impulsó a la industria de los colorantes, de explosivos, en el refinado del petróleo y a la minería en la lixiviación. Un ejemplo de la lixiviación es la obtención de cobre a partir de sulfuros de cobre.

Desde principios del siglo XVIII hasta mediados del siglo XIX, se sumaron veinticuatro nuevos elementos que fueron fehacientemente aislados: vanadio, niobio, tántalo, paladio, cerio, osmio, iridio, rodio, potasio, sodio, calcio, boro, yodo, litio, cadmio, selenio, silicio, aluminio, bromo, torio, lantano, erbio, terbio y rutenio.

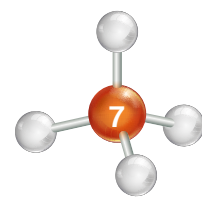
En 1859 fue desarrollada la espectroscopia por **Robert Wilhelm Bunsen (1811-1899)** y **Gustav Robert Kirchhoff (1824-1877)**, la cual consiste en el estudio de la interacción electromagnética cuando los elementos se ionizan por acción de una flama. Con esta técnica fueron identificados otros elementos radiactivos como el cesio y el rubidio.

En 1856, **Henry Bessemer (1813-1898)** dio a conocer su alto horno para la fabricación de acero rico en carbono derivado del carbón mineral, mismo que tuvo un importante crecimiento en ese sector industrial. Fueron posibles, además, aleaciones con otros minerales, como el manganeso, el cromo, el molibdeno, el vanadio, el tungsteno y el niobio, para obtener diferentes durezas en el acero.

Podemos afirmar que la Química Inorgánica fue establecida en el año de 1860, durante el primer Congreso Internacional de Química en la ciudad de Karlsruhe, Alemania, donde se expuso, además de otras problemáticas, su campo de estudio y las dificultades que los químicos encontraron en el pasado.

Muchos científicos propusieron diferentes formas para dar orden a los elementos en las que relacionaban, por ejemplo, el peso atómico y su densidad. Empero, en 1869 el químico ruso **Dimitri Ivánovich Mendeléyev (1834-1907)** publicó la primera clasificación o tabla periódica de los elementos, acomodándolos según su peso atómico y observó una periodicidad en sus propiedades; sin embargo, la tabla presentaba huecos. Conforme se fueron descubriendo más elementos, en especial los gases nobles, las "tierras raras" y los elementos radiactivos se realizó el correspondiente acomodo siguiendo las leyes fundamentales que propuso Mendeléyev.

Poco tiempo después, resultado del estudio del comportamiento de la materia con la energía, fueron identificados el talio y el indio. En 1895, el químico sueco **Per Teodor Cleve (1840-1905)**, el químico británico **William Ramsay (1852-1916)** y el químico sueco **Nils Abraham Langlet (1868-1936)** aislaron el helio, que es un elemento importantísimo dentro de la industria. Ejemplos de







esto, es el uso del helio líquido que tiene aplicaciones directas en la criogenia, en la refrigeración, en la operación de imanes superconductores y en aparatos médicos como escáneres de resonancia magnética.

En 1898, la química y física polaca **Marie Sklodowska Curie (1867-1934)** y su esposo, el físico francés **Pierre Curie (1859-1906)** descubrieron el fenómeno de la radiactividad e identificaron algunos elementos poseedores de esta propiedad, como el torio, y junto con el físico francés **Henri Becquerel (1852-1908)**, también el polonio, el radio y el radón.

Iniciando el siglo XX fueron añadidos veintiséis elementos a los ya descubiertos o aislados. Los nuevos elementos fueron cesio, rubidio, talio, indio, helio, galio, iterbio, holmio, tulio, escandio, samario, gadolinio, praseodimio, neodimio, disprosio, germanio, flúor, argón, kriptón, neón, xenón, polonio, radio, radón, actinio y europio, contabilizando, hasta ese momento, ochenta y cuatro elementos.

**Alfred Werner (1866-1919)**, geofísico alemán, se convirtió en el primer químico inorgánico en ganar el Premio Nobel en 1913, por proponer y demostrar la estructura de compuestos que presentaban diferentes características, a pesar de tener la misma composición química o metal de transición, denominados *complejos*.

Durante la Primera Guerra Mundial, el sector industrial desarrolló una gran cantidad de ácidos y explosivos, lo que impulsó enormemente los avances tecnológicos. En 1922, el físico neerlandés **Dirk Coster (1889-1950)** y el químico-físico sueco **George Hevesy (1885-1966)** aislaron el hafnio, último elemento estable en descubrirse y después sería utilizado en aleaciones para crear materiales electrónicos, así como para su uso en reactores nucleares.

Una aplicación de la química inorgánica en aditivos del combustible para cohetes fue realizada durante la Segunda Guerra Mundial con el uso de hidruros de boro, impulsores de cohetes hacia las capas superiores de la atmósfera.

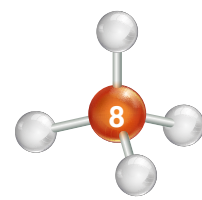
La primera mitad del siglo XX fue la época de los elementos radiactivos, ya que para aislarlos se requería de técnicas más complejas y nuevas formas de manipular la radiactividad. La investigación generó novedosos desarrollos, como la creación de bombas atómicas en la Segunda Guerra Mundial, cuando el prometio fue aislado durante el proyecto Manhattan, en 1945.

Desde los inicios del siglo XX hasta el año de 1950, fueron incorporados a la tabla periódica catorce elementos más: lutecio, renio, hafnio, protactinio, tecnecio, francio, astato, neptunio, plutonio, americio, curio, prometio, berkelio y californio, descubiertos gracias al uso de la técnica de bombardeo de elementos radiactivos, con partículas alfa o con neutrones. Suman, así, noventa y ocho los elementos de la tabla periódica.

Iniciada la segunda mitad del siglo XX, en 1952, por medio de pruebas realizadas durante la primera explosión termonuclear en el Océano Pacífico, se descubrió y aisló el primer elemento sintético: el einstenio.

**Linus Pauling (1901-1994)**, químico estadounidense que, en 1954, ganó el Premio Nobel por sus trabajos sobre la naturaleza de los enlaces químicos, aspecto relevante para comprender el comportamiento de las sustancias. El químico estadounidense **Willard Frank Libby (1908-1980)** mejoró la aplicación de isótopos, creó el método de datación por carbono 14, utilizado en paleontología, arqueología, geología y geofísica.

Al término del siglo XX fue utilizada profusamente la técnica de bombardeo post nuclear para determinar otros elementos radiactivos. A inicios del siglo XXI habían sido aislados dieciséis elementos que se agregaron a la Tabla Periódica: einstenio, fermio, mendelevio, nobelio,





lawrencio, rutherfordio, dubnio, seaborgio, bohrio, meitnerio, hassio, darmastadtio, roentgenio, copernicio, flerovio y livermorio.

A partir del año 2002 y hasta el momento, utilizando el método de bombardeo de partículas y aplicándolo a la fusión nuclear, fueron descubiertos los últimos cuatro elementos (oganesón, nihonio, moscovio y tenessino), los cuales, añadidos a los anteriores, conforman los ciento dieciocho elementos naturales y sintéticos de la Tabla Periódica.

La Química Inorgánica, entonces, ha influido decisivamente en el desarrollo tecnológico de la sociedad y se aplica en todos los resquicios de las ciencias, las cuales generan cotidianamente nuevas ramas y especializaciones. En la medicina ha incrementado sus aplicaciones, varias de ellas ligadas con el uso de los metales para contrarrestar los efectos del cáncer. En México destacan las investigaciones de la doctora Lena Ruiz Azuara, de la Facultad de Química de la UNAM, miembro distinguido de la Royal Society of Chemistry (RSC) de Gran Bretaña y pionera en el estudio de los metales esenciales para los seres vivos; otra relevante contribución es el estudio de las casiopeínas, como alternativa de los medicamentos anticancerígenos: hace un lado el uso del platino en favor del uso del cobre. Las ventajas del uso de las casiopeínas, respecto a los compuestos de platino, es que son más económicas, presentan menos efectos secundarios y son más accesibles para la población que lo requiere. El cobre se encuentra como elemento natural del cuerpo humano aproximadamente 20 mg en una persona con una masa de 70 Kg. Es un metal importante y uno de los principales elementos que funge en el cerebro como transmisor de señales que ayudan al razonamiento y colabora con una de las proteínas que transporta cobre, el superóxido dismutasa, la cual facilita la eliminación de moléculas agresivas que se desarrollan en el organismo. Por ende, el uso de este elemento es más práctico, puesto que el cuerpo humano, al recibir un medicamento a base de cobre, de forma congénita puede desecharlo fácilmente, lo que no ocurre con otros elementos que dañan los riñones y producen sordera, así como otros efectos indeseables.

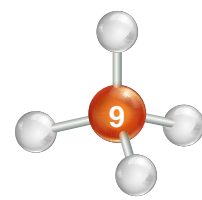
## 1.5 Estado del arte de la Química Orgánica

En la evolución de la Química Orgánica destacan varios hechos relevantes que van, desde su origen, hasta las líneas de investigación más recientes como la organocatálisis.

El primer científico en hablar de la Química Orgánica fue el químico sueco **Jöns Jacob Berzelius (1779-1848)**, quien, en 1807, sugirió que se llamasen *orgánicas* sustancias como el azúcar o el aceite de oliva, productos provenientes de organismos vivos.

Después, el químico alemán **Friedrich Wöhler (1800-1882)** (discípulo de Berzelius), en 1828, sintetizó la urea (un compuesto orgánico) a partir de compuestos inorgánicos, generando una serie de investigaciones que contribuyeron notablemente en los avances de esta rama. Citamos el caso de los primeros colorantes artificiales, creados por el químico británico **W. Perkin (1838-1907)**, en agosto de 1856, a los que llamamos *malveínas*, con los que teñían tejidos de seda. Un ejemplo peculiar es el de la “malva de Perkin”, tinte de los más difíciles de crear, ya que su tonalidad púrpura era muy difícil de obtener naturalmente, debido a la presencia de la *quinina*, compuesto nitrogenado que permite la obtención de esa tonalidad. Así fue estimulada la búsqueda activa de otros colorantes artificiales empleados industrialmente.

Para explicar los mecanismos de formación de productos hechos con base en la química orgánica, fue indispensable averiguar la composición de las sustancias. Las investigaciones dieron lugar a la Química Estructural, en la que se distinguieron químicos como el inglés **Fankland (1825-1899)**, reconocido en 1852 por su teoría de las valencias químicas. En 1855, el químico francés **Adolphe**





**Wurtz (1817-1884)** desarrolló un método para sintetizar hidrocarburos mediante la reacción de los haluros de alquilo con sodio, proceso conocido con el nombre de “Reacción de Wurtz”. El químico francés **Marcellin Berthelot (1827-1907)**, por su parte, en 1856, aisló por primera vez un hidrocarburo en el laboratorio (el metano) y después descubrió el acetileno o etino que es el alquino más simple. Al químico alemán **August Kekulé (1829-1896)** se le debe la principal contribución en el establecimiento de la Teoría de la Estructura Química (1857 - 1858), postulado que parte de la idea de la tetravalencia del carbono la cual permite la formación de cuatro enlaces para cada átomo de este elemento, observables en los siguientes compuestos: en el caso de unir cuatro átomos de hidrógeno se obtiene el metano ( $\text{CH}_4$ ) o dos de oxígeno se obtiene el dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ). Otra aportación de Kekulé, publicada en un artículo de sus manuales *Lehrbuch der organischen Chemie (Manual de química orgánica)*, es la explicación de la estructura del benceno en forma de anillo de seis átomos de carbono unidos mediante enlaces sencillos y dobles alternados.

Otro químico sobresaliente fue el alemán **Adolf von Baeyer (1835-1917)**, quien, en 1864, descubrió resinas como la goma natural (polímero natural). El químico y físico austriaco **Johann Josef Loschmidt (1821-1895)**, también realizó contribuciones relevantes en 1865, ya que efectuó la primera determinación experimental del número de moléculas que hay en una mol, conocida como el *número de Loschmidt*, el cual se le conoce actualmente como el *número de Avogadro*, en honor a las contribuciones realizadas por el físico y químico italiano **Amadeo Avogadro (1776-1856)**. **Butlerov**; en la década de 1860, hizo una propuesta sobre la química estructural y en el periodo que va de 1866 a 1868, demostró experimentalmente la existencia de isómeros y argumentó que, en los compuestos orgánicos insaturados, los carbonos se unen entre sí por enlaces dobles (alquenos) o triples (alquinos). **Emil Erlenmeyer (1825-1909)**, químico alemán que, en 1880, formuló una regla que lleva su nombre, en la que postula que cuando un alqueno tiene un grupo hidroxilo enlazado a uno de los carbonos del doble enlace, se convierte en aldehído o cetona, ante la presencia de un oxidante (Figura 1.1).

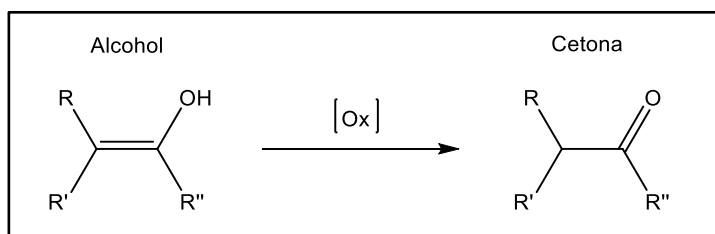
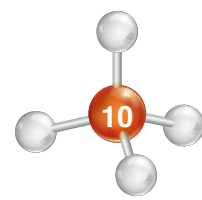


Figura 1.1 Regla de Erlenmeyer.

**Armstrong**, en 1881, realizó síntesis sistemáticas, logrando la degradación y la constitución estructural de muchos derivados del naftaleno, usados en la gasolina y en la petroquímica. **Victor Meyer (1848-1897)**, en 1888, designó con el nombre de *constituciones estereoquímicas* a las estructuras proyectadas bajo el ángulo de la posición geométrica, haciendo nacer la estereoquímica. Estas investigaciones fueron continuación de la labor de científicos como Dumas, Laurent y Gerhardt, realizados en la primera mitad del siglo XIX.

Las investigaciones de **Cannizzaro (1826-1910)**, químico italiano, quien publicó en la revista *Nuovo Cimento* el trabajo titulado “Resumen de un curso de filosofía química”, en el que expuso claramente cómo determinar la masa atómica de los elementos y la masa molecular de los compuestos. **Kolbe** en el periodo de 1849 a 1873, en Alemania, describió varios procesos químicos que llevan su nombre, como la *Electrolisis de Kolbe* aplicada en la obtención de hidrocarburos a partir de la electrólisis de una solución acuosa de sal y un radical carboxílico ( $-\text{COOH}$ ); diseñó también la *Reacción de Kolbe-Schmitt*, con lo que se produce ácido salicílico (precursor de la aspirina) a partir de fenolato sódico y dióxido de carbono.





## 1.5.1 La Química orgánica en el desarrollo experimental

Algunos de los descubrimientos más relevantes de la síntesis orgánica en el laboratorio, fueron aportados por el químico alemán **Rudolph Fittig (1835-1910)**, quien, en 1824, en la *Síntesis de Fittig* enuncia: "Por la acción de los metales alcalinos sobre compuestos aromáticos halogenados, se obtienen derivados alifáticos de compuestos aromáticos (alquilbencenos)" (Figura 1.2). Posteriormente el químico francés **Adolphe Wurtz (1817-1884)**, en 1869, obtuvo de las aminas alifáticas, polialcoholes y radicales mixtos; el químico y mineralogista francés **Charles Friedel (1832-1899)** y el químico estadounidense **James Crafts (1839-1917)**, en 1877, dieron a conocer una reacción que consiste en introducir radicales hidrocarbonados a anillos aromáticos u otros compuestos de carbono alifáticos empleando tricloruro de aluminio; tan grande fue su contribución que esta reacción también lleva el nombre de sus descubridores: *Reacción de Friedel-Crafts*, (Figura 1.3). Por otro lado, los químicos alemanes **Carls Schotten (1853-1910)** y **Eugen Baumann (1846-1896)**, en 1884, contribuyeron con una reacción de formación de amidas a partir de cloruro de ácidos y aminas primarias, la cual también lleva sus nombres: *Reacción de Schotten-Baumann* (Figura 1.4). En el año de 1900, el químico francés **Victor Grignard (1871-1935)**, desarrolló una reacción que cambió por completo la síntesis orgánica al formar carboaniones a partir de sus correspondientes halogenuros y magnesio metálico. El químico alemán **Wilhelm Normann (1870-1939)**, en 1902, aplicando la hidrogenación catalítica en la industria, logró la reducción de  $\text{CO}_2$  y  $\text{CO}$  a aldehídos, alcoholes e hidrocarburos (Wojtkowiak, B. 1987).

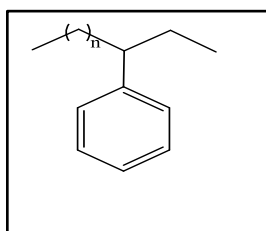


Figura 1.2 Estructura de los alquilbencenos.

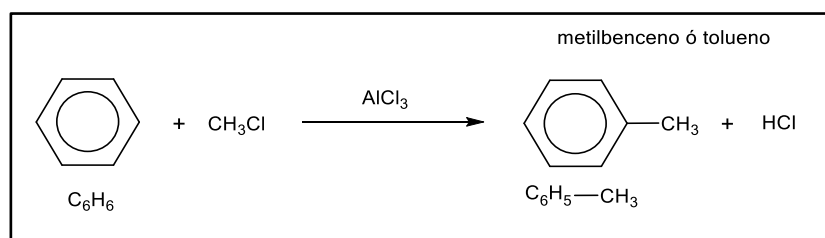


Figura 1.3 Ejemplo de la Reacción de Friedel-Crafts.

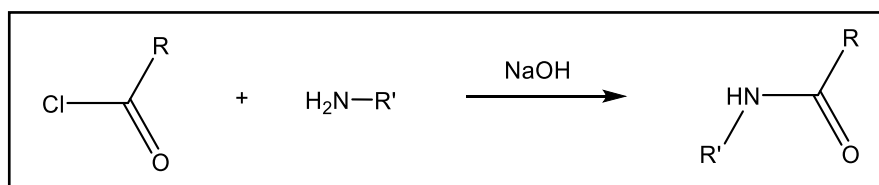
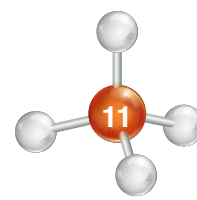


Figura 1.4 Ejemplo de la Reacción de Schotten-Baumann.

Posteriormente, y a raíz de los trabajos realizados por el químico francés **Michel Chevreul (1786-1889)** y el químico alemán **Justus von Liebig (1803-1873)** a principios y mediados del siglo XIX sobre los ácidos grasos, el interés de los químicos se fue orientando hacia el estudio de los glúcidos y los prótidos que se encuentran dentro de los grupos que constituyen a los alimentos naturales.

Algunos otros científicos que se interesaron por el estudio de los glúcidos (celulosa, azúcares y almidón), fueron el químico francés **Louis Pasteur (1822-1895)**, quien, en 1849, estudió la isomería óptica del ácido tartárico ( $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_6$ ), que consiste en tener dos compuestos con actividad óptica inversa a partir de la misma composición química. **Emil Fischer (1852-1919)**, en 1876, realizó el aislamiento de azúcares a partir de fenilhidracina ( $\text{C}_6\text{H}_5\text{NHNH}_2$ ), determinó la estructura molecular de la glucosa y la fructosa (entre otros azúcares) y describió la fórmula de los derivados de la purina, como por ejemplo el ácido úrico y la cafeína.



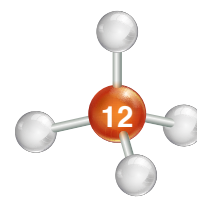




### 1.5.2 Desarrollo de la Química orgánica durante la segunda mitad del siglo XIX y primera del siglo XX

La Química orgánica permitió el desarrollo de nuevas aplicaciones a corto y mediano plazo, por lo que es posible dividirla en cuatro líneas o etapas de investigación. La primera etapa de investigaciones comenzó en 1897 con la aportación de los químicos franceses **Paul Sabatier (1854-1941)** y **Jean-Baptiste Senderens (1856-1937)**, quienes realizaron experimentos con los catalizadores metálicos para la formación de diferentes hidrocarburos, tanto líquidos como gaseosos. La Segunda etapa está relacionada con la simplificación de materiales plásticos y de cauchos sintéticos (polímeros) como la polimerización del isopreno, gracias a las contribuciones de **Bourchardat** (en el periodo que va de 1875 a 1879). El tercero corresponde al sector industrial, donde se desarrolló la química de los colorantes, donde la aportación de la tabla de Schultz fue muy relevante, y donde se incluían más de 681 colorantes fabricados industrialmente (después llegó a superar los 900). El cuarto sector se relaciona con los productos farmacéuticos, a partir de 1903, con las fábricas de **Bayer**, **Merck** y **Höchst**, donde se llevaron a cabo descubrimientos en medicamentos, antibióticos y compuestos vitamínicos importantes. Por ejemplo, el descubrimiento del medicamento contra la malaria, antibióticos como la ampicilina, las vitaminas B y D y muchos otros productos de utilidad para el ser humano. En México, se puede destacar en 1968 la investigación del químico de productos naturales **Alfonso Romo de Vivar** del Instituto de Química de la UNAM, quién logró el aislamiento de las moléculas llamadas *mexicaninas* producidas por la planta “rosilla de Puebla” (*Helenium mexicanum*). Estos compuestos son insecticidas naturales, de manera que cuando se colocan en las plantas, ahuyentan a los insectos que ahí se encuentran, permitiendo el mejor desarrollo del vegetal.

La Química orgánica, a lo largo del siglo XX y en lo que va del XXI, se ha diversificado creando ramas específicas, nuevas tecnologías y aplicaciones en de los diferentes sectores de la sociedad.





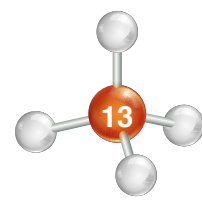


## 1.6 Autoevaluación

### Cuestionario de autoevaluación del Capítulo 1

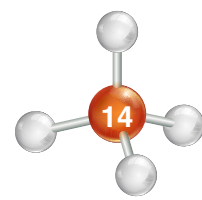
Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

- Ciencia que estudia aquellos procesos donde se obtienen unas sustancias a partir de otras.
  - Geoquímica
  - Geología Histórica
  - Sedimentología
  - Estratigrafía
- Ciencia que estudia la materia, así como los cambios que en ella ocurren.
  - Biología
  - Física
  - Química
  - Geoquímica
- Fue el primer mineral que el hombre utilizó y explotó, entre los 5200 y los 4500 años a.C., para la creación de ornamentos, utensilios y armas.
  - Bronce
  - Plata
  - Oro
  - Cobre
- Palabra que se toma como un antecedente de la palabra química.
  - Chemica
  - Khemeia
  - Chimica
  - Kemeia
- Discípulo de Pitágoras, quien unió todas las corrientes filosóficas antiguas para proponer que el agua, el aire, el fuego y la tierra, son los elementos que dan origen a todo lo que nos rodea.
  - Empédocles
  - Tales de Mileto
  - Arquímedes
  - Demócrito
- En conjunto postularon que la materia estaba constituida por pequeñas partículas a las cuales llamaron átomos.
  - Pitágoras y Empédocles
  - Leucipo y Demócrito
  - Anaxímenes y Tales de Mileto
  - Aristóteles y sus discípulos
- Científico que enunció la ley de la conservación de la materia y, además, se le conoce como el padre de la química moderna.
  - Jöns Jacob Berzelius
  - Alessandro Volta
  - Antoine Laurent Lavoisier
  - Gustav Robert Kirchhoff
- Primer científico, quien sugirió, que se llamasen "orgánicas" a aquellas sustancias como el azúcar o el aceite de oliva, productos provenientes de organismos vivos.
  - Friedrich Wöhler
  - Adolphe Wurtz
  - Kekulé
  - Jöns Jacob Berzelius





9. Científico que, en 1856, aisló por primera vez el metano en el laboratorio.
- |                     |                         |
|---------------------|-------------------------|
| a) Friedrich Wöhler | b) Adolphe Wurtz        |
| c) Berthelot        | d) Jöns Jacob Berzelius |
10. Químico mexicano que aisló exitosamente las moléculas de las llamadas “mexicaninas”, generando un insecticida natural que permite un mejor desarrollo vegetal.
- |                          |                     |
|--------------------------|---------------------|
| a) Andrés Manuel del Río | b) Lena Ruiz Azuara |
| c) Alfonso Romo de Vivar | d) Mario Molina     |





# Capítulo 2

## Estructura Atómica

Rogelio Soto Ayala, José Luis Arcos Hernández, Carlos Armando Castillo Jon

### 2.1 Introducción

El conocimiento de la estructura atómica es el comprender detalladamente el comportamiento, propiedades y características de los elementos y, con ello, de la materia; así mismo permite el conocer las aplicaciones de la radiactividad y sus efectos de empleo de manera adecuada, responsable y con distintos propósitos en las Ciencias de la Tierra.

Es muy importante tener en cuenta el modelo atómico de la mecánica cuántica con el fin de conocer las configuraciones electrónicas de los elementos y, de esta manera, predecir su comportamiento magnético.

### 2.2 Teoría atómica de la materia y la estructura del átomo

En la antigüedad, los grandes filósofos griegos especularon sobre la naturaleza de la materia, de la que pensaban se encontraba constituido el mundo. **Demócrito (460-370 a.C.)** afirmaba que el mundo se encontraba conformado por partículas extremadamente pequeñas y a su vez indivisibles a las que llamó “**Átomos**”. Sin embargo, el término cayó en desuso durante muchos siglos, debido a la aceptación generalizada en el mundo occidental de las corrientes filosóficas de **Platón (427-347 a.C.)** y **Aristóteles (384-322 a.C.)**, las cuales concebían a la materia como un medio continuo, es decir, afirmaban que no podían existir partículas indivisibles que constituyeran la misma.

#### 2.2.1 John Dalton y el átomo

Fue durante el siglo XVII cuando los científicos experimentaron con reacciones químicas y por medio de ellas intentaron medir y cuantificar los elementos que podían reaccionar entre sí para conformar nuevas sustancias; es en este punto de la historia cuando la concepción atómica de Demócrito sería retomada y se sentarían las bases de la llamada teoría atómica, la cual vinculaba acertadamente las ideas de “Elementos Químicos” y “Átomos”.

Fue el científico inglés **John Dalton (1766-1844)** quien, en 1808, definió de una manera más acertada al “átomo”, iniciando así, la teoría atómica (Figura 2.1), la cual se apoyó en cuatro postulados generales:

#### Sumario

##### 2.1 Introducción

##### 2.2 Teoría atómica de la materia y la estructura del átomo

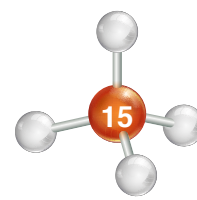
##### 2.3 La radiactividad

##### 2.4 Modelo atómico de la mecánica cuántica

##### 2.5 Propiedades magnéticas de las sustancias

##### 2.6 Aplicaciones de las propiedades magnéticas de las sustancias en las Ciencias de la Tierra

##### 2.7 Autoevaluación





1. Cada elemento químico se encuentra conformado por partículas extremadamente pequeñas e indivisibles llamadas átomos.
2. Todos aquellos átomos de un mismo elemento resultan idénticos entre sí, pero distintos a los átomos de otros elementos.
3. Los compuestos se forman cuando los átomos de un elemento X y los de un elemento Y reaccionan combinándose en proporciones simples. Por ejemplo: un átomo de X se combina con un átomo de Y resultando un compuesto (XY).
4. Los átomos de un elemento no se pueden transformar en átomos de otro elemento mediante reacciones químicas. Dichas reacciones implican únicamente la separación, combinación o reordenamiento de los átomos los cuales no se crean ni se destruyen mediante reacciones químicas.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

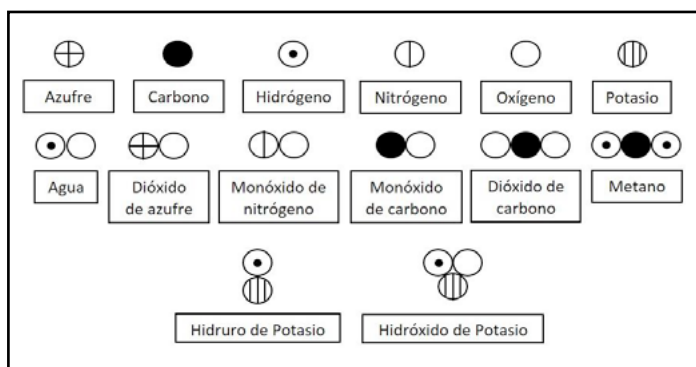


Figura 2.1. Modelo atómico de John Dalton.

La concepción atómica de Dalton fue resultado de la observación de múltiples reacciones químicas llevadas a cabo en el laboratorio; sin embargo, a medida que los científicos fueron ideando y desarrollando métodos experimentales cuya finalidad era el comprender la naturaleza y comportamiento de la materia, el átomo, que hasta hacía poco suponía indivisible, comenzó a mostrar indicios de poseer una estructura interna mucho más compleja.

### 2.2.2 Experimento de Thomson: naturaleza de los rayos catódicos

A mediados del siglo XIX, muchos científicos llevaron a cabo experimentos con la finalidad de estudiar las descargas eléctricas que se daban a través de un tubo de vidrio, el cual se presumía vacío y que contaba en su interior con dos electrodos en sus extremos. Estas descargas fueron llamadas “rayos catódicos” porque dicha radiación se originaba en el electrodo negativo (cátodo) y viajaba en línea recta hacia el electrodo positivo (ánodo).

Los rayos catódicos no fueron visibles en primera instancia y su presencia se pudo detectar debido a que ciertos materiales expuestos a ellos presentaron fluorescencia o luminiscencia.

En 1897 el físico inglés **J.J. Thomson (1856-1940)** determinó con una considerable precisión la **relación entre la carga eléctrica y la masa de un electrón**

$$\frac{e}{m} = -1.76 \times 10^8 \frac{C}{g}$$

Thomson llegó a este resultado experimentando con un tubo de rayos catódicos, al aplicar campos eléctricos y magnéticos. Alrededor de los tubos de descargas pudo observar que los rayos catódicos eran desviados hacia el polo norte del campo magnético, de esta manera se evidenció la naturaleza y carga negativa de los mismos, a los que consideró conformados por pequeños corpúsculos a los que posteriormente se les conocería como “**electrones**” (Figura 2.2).

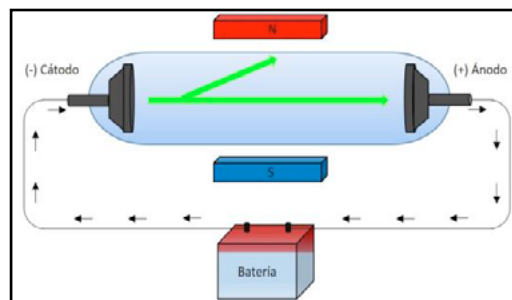
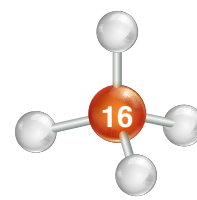


Figura 2.2. Experimento de Thomson.





### 2.2.3 Experimento de Millikan: Carga eléctrica y masa del electrón

En 1909 **Robert Millikan (1868-1953)** logró calcular experimentalmente la **carga del electrón**, cuyo valor expresado en Coulombs es:

$$e = -1.6022 \times 10^{-19} \text{ C}$$

En su experimento analizó minuciosamente el movimiento de caída de unas minúsculas gotas de aceite que se encontraban suspendidas en el aire, a través de la lente de un microscopio. Dichas gotas adquirirían cargas eléctricas a partir de una fuente emisora de rayos X (Figura 2.3).

Una vez obtenido el valor de la **carga del electrón (e)**, Millikan pudo calcular la **masa del electrón** (aproximadamente 1800 veces más pequeña que la masa del hidrógeno) haciendo uso de la **relación carga masa del electrón** obtenida por Thomson.

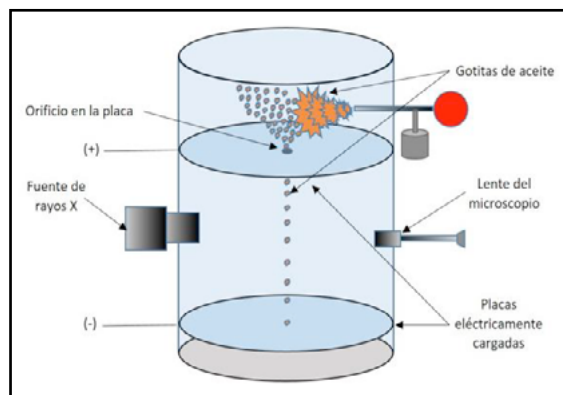


Figura 2.3. Experimento de Millikan.

$$\text{masa del electrón} = \frac{-1.6022 \times 10^{-19} \text{ C}}{-1.76 \times 10^8 \frac{\text{C}}{\text{g}}} = 9.1094 \times 10^{-28} \text{ g}$$

### 2.2.4 Modelo atómico de Thomson

Una vez que el electrón fue considerado como partícula fundamental de la materia, los físicos comenzaron a especular sobre la configuración y estructura de los átomos. De esta manera, en 1904, ya eran conocidas dos características fundamentales de los átomos:

- Los átomos contienen electrones.
- Los átomos son eléctricamente neutros.

En 1904 el científico John Joseph Thomson (1856-1940) propuso su modelo atómico, en el cual, el átomo está formado por electrones de carga negativa incrustados en una esfera de carga positiva similar a un “pudín con pasas”. Los electrones están repartidos de manera uniforme y el átomo en conjunto es eléctricamente neutro; es decir, las cargas negativas de los electrones se compensan con la carga positiva en la esfera. (Figura 2.4).

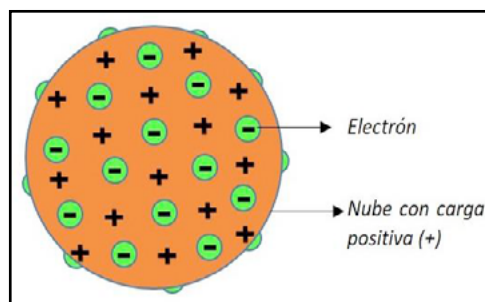


Figura 2.4. Modelo atómico de Thomson.

## 2.3 La Radiactividad

La radiactividad fue descubierta en 1896 de manera accidental por el científico francés **Henri Becquerel (1852-1908)**. Al estudiar las propiedades fluorescentes de las sustancias se dio cuenta que un compuesto de uranio emitía, de manera espontánea, una radiación de alta energía. Este fenómeno es conocido ahora con el nombre de radiactividad.

### 2.3.1 Wilhelm Röntgen: Rayos X

En 1895 **Wilhelm Röntgen (1845-1923)** descubrió los rayos X al llevar a cabo experimentos con los tubos de descargas. Observó que cuando los rayos catódicos chocaban contra ciertos materiales (cobre, cromo, hierro, etc.), se emitía una radiación de naturaleza diferente a la de los rayos catódicos (Figura 2.5). Röntgen los llamó rayos X debido a su naturaleza desconocida ya que la





trayectoria de dicha radiación no se veía afectada en absoluto por campos magnéticos, evidenciando un origen distinto al de los rayos catódicos.

### 2.3.2 Ernest Rutherford: Partículas alfa ( $\alpha$ ) beta ( $\beta$ ) y gamma ( $\gamma$ )

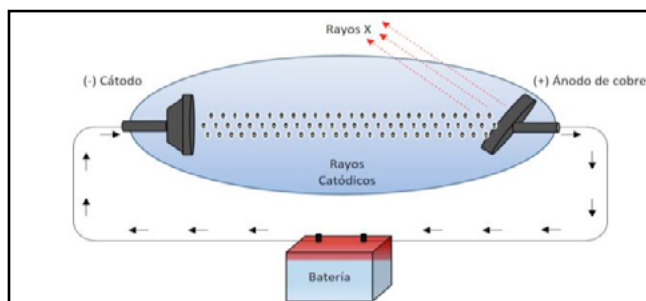


Figura 2.5. Experimento de Röntgen: emisión de rayos X.

A comienzos del siglo XX, **Marie Curie (1867-1934)** y **Pierre Curie (1859-1906)** se dedicaron al estudio y descripción del fenómeno de la radiactividad que había sido descubierto por Becquerel. Asimismo, **Ernest Rutherford (1871-1937)** y **Frederick Soddy (1877-1956)** intentaban explicar el fenómeno de la radiactividad mediante algunos experimentos, hasta que, finalmente consiguieron demostrar que los núcleos atómicos inestables de los elementos radiactivos se desintegraban transformándose en el acto, en otro elemento distinto (decaimiento radiactivo). Comprobaron que el fenómeno de la radiactividad conlleva cambios fundamentales en el núcleo atómico en cuestión. Esta importante observación eliminó del horizonte científico el paradigma de la indivisibilidad del átomo propuesta por Demócrito y posteriormente sostenida por Dalton.

Rutherford identificó las partículas alfa y beta provenientes de elementos radiactivos y las describió enlistando sus características fundamentales:

- Las partículas alfa cuentan con dos unidades fundamentales de carga positiva y poseen la misma masa que los átomos de helio.
- Las partículas beta tienen carga negativa y poseen la misma masa y propiedades que los electrones.

Por su parte, **Paul Villard (1860-1934)** en el año de 1900, logra identificar en un tercer tipo de radiación electromagnética a la cual describe como una radiación electromagnética de alta energía extremadamente penetrante a la cual llamó partículas gamma. En la Figura 2.6 se esquematiza una fuente de rayos *alfa* ( $\alpha$ ), *beta* ( $\beta$ ) y *gamma* ( $\gamma$ ), y en la tabla 2.1 se indican algunas de las características de dichas radiaciones.

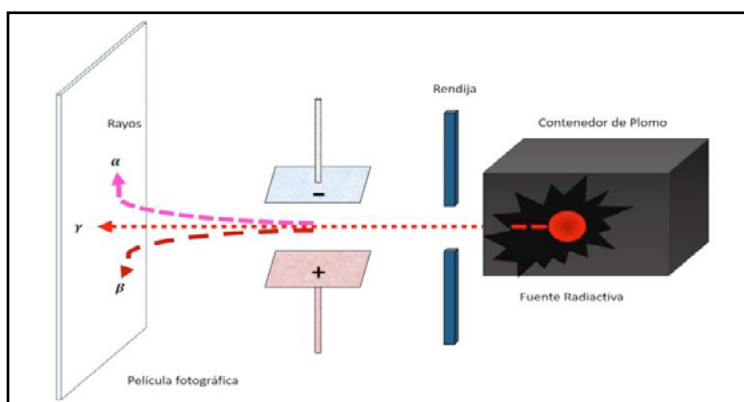


Figura 2.6 Esquematización de una fuente de los rayos alfa ( $\alpha$ ), beta ( $\beta$ ) y gamma ( $\gamma$ ).

Radiación	Carga Eléctrica	Masa	Naturaleza de la Partícula	Poder relativo de penetración
Rayos Alfa ( $\alpha$ )	2+	$6.44 \times 10^{-24}$ g	Núcleos de Helio	1
Rayos Beta ( $\beta$ )	1-	$9.10 \times 10^{-28}$ g	Electrones a gran velocidad	100
Rayos Gamma ( $\gamma$ )	0	0	Fotones de alta energía	1000

Tabla 2.1 Características de las radiaciones: alfa ( $\alpha$ ), beta ( $\beta$ ) y gamma ( $\gamma$ ).

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22



### 2.3.3 Modelo atómico de Rutherford-Chadwick

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

En 1910 **Ernest Rutherford (1871-1937)** llevó a cabo su famoso experimento con la finalidad de estudiar y comprender la estructura de los átomos; en su experimento, Rutherford bombardeó unas laminillas muy delgadas de oro y de otros metales con partículas alfa y estudió los ángulos de desviación o dispersión de las partículas alfa, observando que la mayoría de ellas atravesaba la laminilla sin desviarse o con ángulos de desviación muy pequeños y de manera sorprendente en algunos casos las partículas alfa presentaron ángulos de desviación muy grandes o regresaban por la misma trayectoria hacia la fuente emisora. Este último comportamiento puso en entredicho el modelo de Thomson, ya que se esperaba que todas las partículas alfa atravesaran la laminilla sin desviarse o con una desviación mínima debido a la carga positiva que Thomson describiera como una nube difusa cargada positivamente.

Años después, Rutherford propuso un nuevo modelo atómico que explicaba los resultados de sus experimentos. En dicho modelo observó que en el volumen del átomo se encuentra un gran espacio vacío; de esta manera explicó por qué la mayoría de las partículas alfa atravesaban la laminilla de oro. Igualmente describió la fuerza de repulsión responsable de los cambios drásticos de trayectoria en las partículas alfa, introduciendo la idea de un “**núcleo atómico**”, el cual describió como un denso conglomerado central en el cual se encuentran las cargas positivas de los átomos a las cuales llamó “**protones**”. Thomson consideró, para su modelo, que los electrones se encontraban girando a gran velocidad alrededor del núcleo.

El modelo de Rutherford no explicaba la relación entre la masa del átomo de helio y un átomo de hidrógeno, el cual, según el modelo mismo debía ser 2:1; sin embargo, en la práctica la relación es de 4:1. Rutherford y otros científicos visualizaron la idea de un tercer tipo de partícula subatómica que debía ubicarse en el núcleo atómico. La existencia de dicha partícula fue establecida en 1932, cuando **James Chadwick (1891-1974)** bombardeó una laminilla de berilio con partículas alfa y observó que este metal emitió una radiación de muy alta energía, muy similar a los rayos gamma. Experimentos posteriores mostraron que esos rayos eran en realidad un tercer tipo de partículas subatómicas a las que Chadwick llamó “**neutrones**”.

En la Figura 2.7 se esquematizan los modelos atómicos de Rutherford y Rutherford-Chadwick donde se observan las partículas subatómicas fundamentales.

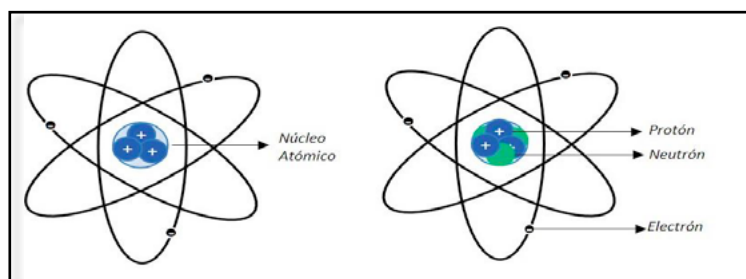


Figura 2.7. Modelo atómico de Rutherford (izquierda) y Modelo atómico de Rutherford-Chadwick (derecha).

### 2.3.4 Estructura del átomo para el estudio de la Química

Desde la época de Dalton, los científicos se habían interesado formalmente por conocer la naturaleza de la materia. Con los avances tecnológicos de la actualidad, los físicos han comprendido y explicado de una manera más profunda y especializada la naturaleza del átomo y han logrado nuevos hallazgos relacionados con partículas subatómicas. Actualmente siguen ocurriendo notables descubrimientos. Sin embargo, para el estudio de la Química se opta por una concepción atómica sencilla, debido a que únicamente tres partículas subatómicas inciden de manera directa en el comportamiento químico de las sustancias: el electrón, protón y neutrón.



Anteriormente se estableció que la carga eléctrica del electrón es de  $-1.6022 \times 10^{-19}$  C y que la carga eléctrica del protón es de  $1.6022 \times 10^{-19}$  C que es, evidentemente, igual en magnitud que la del electrón. Esta magnitud también es conocida como **carga electrónica**. Para su uso en la Química, la convención dicta que las cargas de las partículas atómicas y subatómicas deben ser expresadas como múltiplos de esta carga y no en coulombs, de este modo, afirmamos que la carga del electrón es de -1 y la del protón +1, respectivamente, tal como se observa en la tabla 2.2.

Partícula	Masa (g)	Carga (C)	Unidad de Carga
Electrón*	$9.10938 \times 10^{-28}$	$-1.6022 \times 10^{-19}$	-1
Protón	$1.67262 \times 10^{-24}$	$+1.6022 \times 10^{-19}$	1
Neutrón	$1.67493 \times 10^{-24}$	0	0

Tabla 2.2 Masa y carga de las partículas subatómicas fundamentales.

\*Las mediciones más refinadas aportan un valor más preciso de la masa de un electrón que las de Millikan.

### 2.3.5 Aplicaciones de la radiactividad en las Ciencias de la Tierra

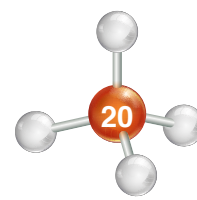
La aplicación de la radiactividad supone una ayuda muy importante para los estudios en Geociencias. Dichos estudios van desde el fechamiento de rocas por **datación radiométrica** hasta la evaluación de la producción de pozos petroleros mediante **registros de producción por trazadores radiactivos** o el uso de **registros geofísicos de pozos**, cuya correcta interpretación es clave para definir con mayor certidumbre las litologías saturadas de hidrocarburo para la incorporación de reservas petroleras y su posterior explotación.

#### 2.3.5.1 Registros Geofísicos de Pozos

Para fines didácticos, será abordada una aplicación interdisciplinaria en las Ciencias de la Tierra: los **registros geofísicos de pozos**, que son usados por ingenieros mineros, geólogos, geofísicos y petroleros; se destaca que es en la industria petrolera donde son utilizados con mucha mayor frecuencia ya que resultan de singular importancia para la evaluación del potencial petrolero en los yacimientos. Los registros geofísicos de pozos que serán citados no agotan los registros que existen en la industria petrolera ya que existen registros de múltiples tipos y principios de operación. Por ello, se incluye una breve semblanza de los “registros básicos radiactivos convencionales”, que tienen como principio de funcionamiento la emisión de partículas por medio de fuentes radiactivas o la medición de la radiactividad por medio de detectores radiactivos.

Los registros geofísicos de pozos son una representación gráfica de una propiedad de la roca contra la profundidad. Dichos registros son tomados en los pozos mediante una herramienta que es colocada en el fondo de estos y es la encargada de censar las propiedades de interés en la roca; la herramienta es jalada a una velocidad constante hacia la superficie por un cable sujeto a un malacate. Dicho cable cumple la función de enviar la información que toma la herramienta a medida que se va dando el movimiento ascendente; de esta manera, una computadora en superficie registra y procesa la información en tiempo real y la grafica con la finalidad de conocer con cierto grado de precisión la respuesta obtenida por la herramienta a través de la longitud total del pozo. Son tres los aspectos fundamentales que deben ser abordados en el sistema roca-fluidos:

1. Litología: es la naturaleza macroscópica de la composición mineral, textura, color y granulometría de las rocas.
2. Porosidad: es la fracción del volumen de roca que es ocupado por los fluidos.





- Saturación de fluidos: fracción del volumen poroso que es ocupado por fluidos agua, aceite y gas.

### 2.3.5.2 Registro de rayos gamma naturales

Es un registro que mide la radiactividad presente en las rocas causada por la presencia de elementos radiactivos tales como el uranio, torio y potasio, elementos que presentan cierta tendencia a concentrarse en formaciones arcillosas como las lutitas. Debido a este comportamiento este registro nos permite determinar el contenido de arcilla (índice de arcillosidad) en las formaciones geológicas en una corrida por medio de un contador de centelleo contenido en una sonda o herramienta que recorre el pozo, arrojando una curva de rayos gamma naturales que muestra la diferencia de radiactividad entre los horizontes geológicos presentes en el pozo.

### 2.3.5.3 Registro de neutrones

Los neutrones son partículas subatómicas sin carga eléctrica, cuya masa es casi idéntica a la del protón.

Con este registro de neutrones se puede conocer de manera indirecta la porosidad de las rocas con base en el contenido de hidrógeno de las formaciones geológicas; la herramienta consta de una fuente radiactiva que emite neutrones de alta energía que al chocar con los núcleos atómicos de las sustancias que conforman las rocas, rebotan elásticamente perdiendo parte de su energía. Esta pérdida depende directamente de la masa del núcleo con el cual choca. La mayor pérdida de energía ocurre al chocar con los átomos de hidrógeno, permitiendo que los neutrones puedan ser captados por núcleos de átomos como sílice, cloro, hidrógeno, etc. Los núcleos que reciben al neutrón responden emitiendo rayos gamma detectables por la herramienta. Debido a este comportamiento, con el registro de neutrones es posible conocer la cantidad de hidrógeno en las formaciones geológicas; esto es, la fracción del volumen poroso saturado con líquido en las formaciones (agua o aceite).

La Figura 2.8 muestra dos registros de pozos. Para la correcta evaluación y certera interpretación de las formaciones de un pozo, es necesario contar con la mayor cantidad de registros posibles.

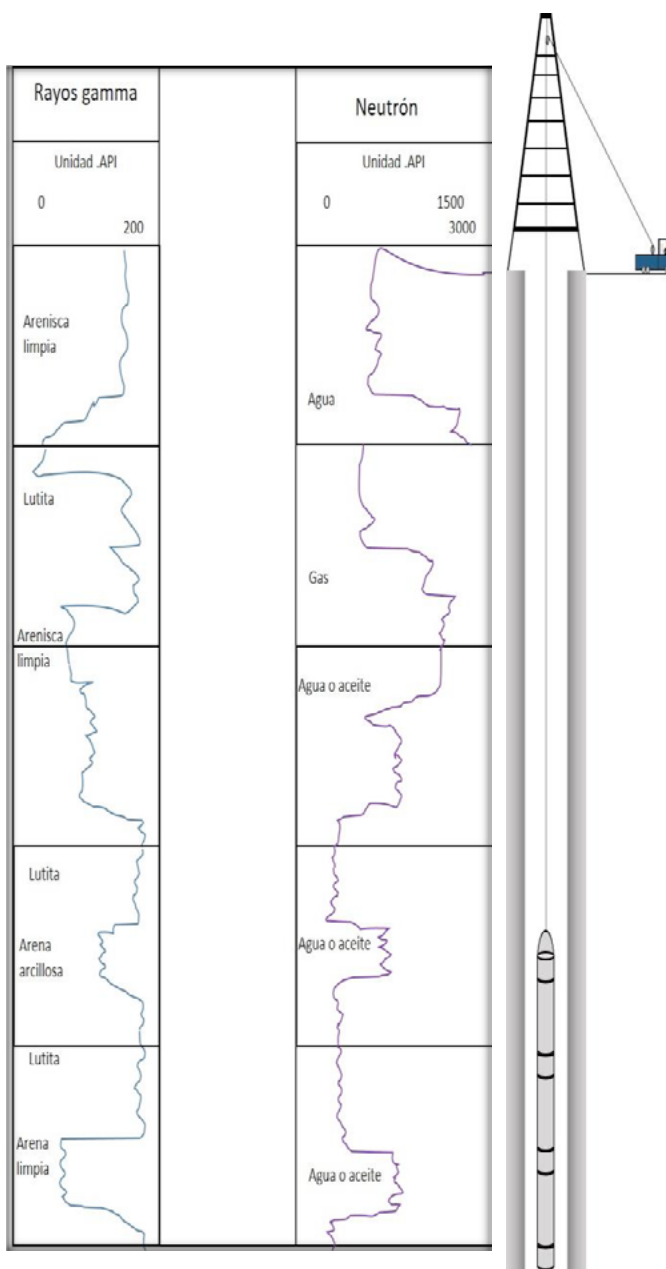


Figura 2.8. Corrida de registros de rayos gamma y porosidad Neutrón.





## 2.4 Modelo atómico de la mecánica cuántica

El modelo atómico de la mecánica cuántica es producto de los avances y descubrimientos de la física moderna; dicho modelo es el que mejor se ajusta al comportamiento real de la materia puesto que describe la configuración de las partículas subatómicas fundamentales dentro del átomo; para comprender dicho modelo es necesario profundizar en el estudio del comportamiento y ordenamiento del electrón dentro del átomo.

### 2.4.1 Propiedades de las ondas y la radiación electromagnética

El científico inglés **James Clerk Maxwell (1831-1879)** se dedicó al estudio de la radiación electromagnética y la definió como la emisión y transmisión de energía en forma de ondas electromagnéticas. A partir del trabajo de Maxwell se sabe que una onda electromagnética consta de una componente de campo eléctrico y una componente de campo magnético, ambas componentes vibran con la misma longitud de onda y frecuencia; por lo tanto, viajan a la misma velocidad en planos ortogonales entre sí (Figura 2.9). Para comprender el trabajo de Maxwell también es necesario conocer las propiedades básicas de las ondas (Figura 2.10).

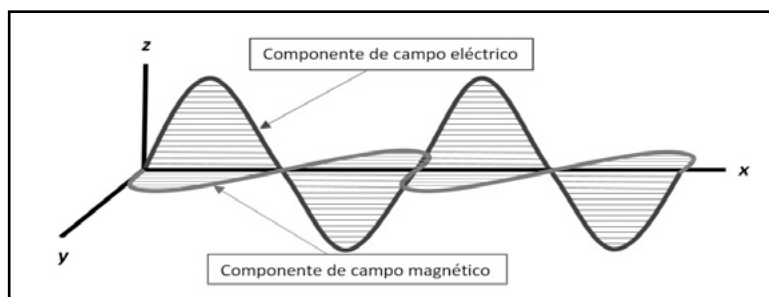


Figura 2.9. Componentes de la radiación electromagnética.

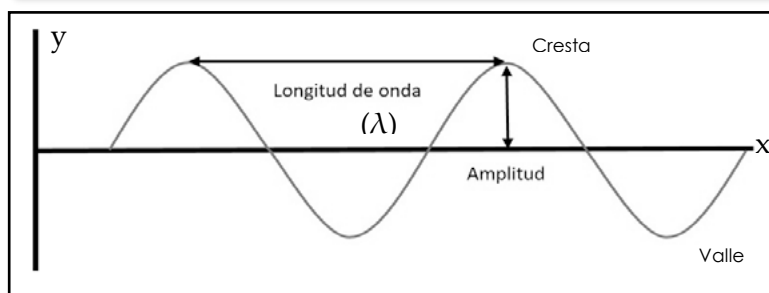


Figura 2.10. Propiedades básicas de las ondas.

- **Amplitud:** es la distancia vertical de la línea media a la cresta o valle de la onda.
- **Longitud de onda ( $\lambda$ ):** es la distancia horizontal entre dos crestas consecutivas de una onda y se expresa comúnmente en nanómetros (nm).
- **Frecuencia ( $\nu$ ):** es la cantidad de ondas que pasan por un punto en un segundo expresada en (Hz).

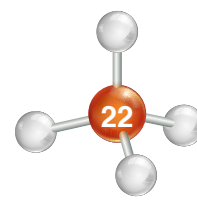
$$\frac{1 \text{ ciclo}}{s} = 1 \text{ Hz}$$

- **Rapidez ( $u$ ):** propiedad de la onda y es el producto de su longitud de onda y su frecuencia:

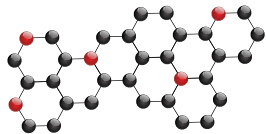
$$u = \lambda \nu$$

Las ondas electromagnéticas (incluida la luz visible) viajan a  $3 \times 10^8$  (m/s), a esta magnitud se le conoce como **rapidez de la luz** o **velocidad de propagación de la luz en el vacío**, es representada con la letra "c" y reconocida como una constante universal.

$$c = \lambda \nu$$







## 2.4.2 Max Planck: Teoría cuántica ondulatoria

La llamada teoría cuántica ondulatoria surgió del trabajo del científico **Max Planck (1858-1947)** quien estudió los llamados “cuerpos negros”, cuerpos capaces de absorber toda energía electromagnética que incide sobre ellos. A tal proceso de absorción responden con la emisión de una radiación electromagnética que consta de una amplia variedad de longitudes de onda (luz). Planck observó que las longitudes de onda corta del espectro emitido se ajustaban a los resultados predichos por la mecánica estadística y el modelo ondulatorio de la luz, pero las longitudes de onda más largas no se ajustaban a los resultados predichos por dichas disciplinas.

Resolvió esta inconsistencia desarrollando la *teoría cuántica ondulatoria*, la cual asume que los átomos y las moléculas son capaces de emitir o absorber cantidades discretas de energía (cuantizada) en forma de radiación electromagnética. A esa cantidad mínima de energía que los átomos pueden absorber o emitir la llamó *cuanto* y estableció que la expresión matemática para calcular dicha energía “*E*” es:

Donde: 
$$E = h\nu$$

**E:** energía de un cuanto, comúnmente expresada en joules.

**h:** es la *constante de Planck* que tiene el valor de  $6.62607 \times 10^{-34} \text{ Js}$

**v:** es la frecuencia de la radiación que se puede expresar con el cociente  $\frac{c}{\lambda}$ .

De esta manera se puede reescribir la ecuación inicial como: 
$$E = h \frac{c}{\lambda}$$

De acuerdo con el trabajo de Planck, los átomos siempre emiten o absorben energía en forma “*cuantizada*”; por lo tanto, la emisión y absorción de energía se da únicamente en múltiplos de *hv*, es decir, **1hv, 2hv, 3hv**, etc.

### PROBLEMA TIPO:

Calcule la longitud de onda y frecuencia de la radiación que es captada en un instante por un contador de centelleo ubicado dentro de una herramienta de toma de registros de rayos gamma en un pozo petrolero, asumiendo que dicha radiación proviene de un isótopo de potasio  $^{40}\text{K}$  que decae con la emisión de un solo rayo de 1.46 MeV dando como resultado un isótopo estable de argón.

*Solución:*

$$1\text{eV} = 1.602176565 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Por lo tanto  $1.46 \times 10^6 \text{ eV} = 2.3392 \times 10^{-13} \text{ J}$

Despejando de la ecuación de Planck:  $E = h \frac{c}{\lambda}$  se tiene que:  $\lambda = h \frac{c}{E}$

$$\lambda = (6.62607 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}) \frac{3.0 \times 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{2.3392 \times 10^{-13} \text{ J}}$$

$$\lambda = 8.4979 \times 10^{-13} \text{ m}$$

La frecuencia de la radiación gamma está dada por la ecuación:  $\nu = \frac{c}{\lambda}$

$$\nu = \frac{3.0 \times 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{8.4979 \times 10^{-13} \text{ m}} = 3.5303 \times 10^{20} \text{ Hz}$$

*Observaciones:* Los estudios geológicos establecen que el contenido de uranio en las rocas se encuentra asociado a la cantidad de materia orgánica presente en ellas; asimismo se sabe que el potasio  $^{40}\text{K}$  es la fuente de radiación natural más abundante en las rocas. Para la radiación gamma, las longitudes de onda son inferiores a  $10^{-11} \text{ m}$ , y las frecuencias resultan superiores a  $10^{19} \text{ Hz}$ .

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

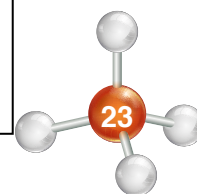
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





### 2.4.3 Albert Einstein: Efecto fotoeléctrico

En el año de 1905, el físico **Albert Einstein (1879-1955)** utilizó nuevamente la teoría cuántica de Planck para explicar el fenómeno llamado *efecto fotoeléctrico*, ya que la teoría ondulatoria de la luz no podía explicar satisfactoriamente dicho fenómeno.

El efecto fotoeléctrico ocurre cuando ciertos metales reaccionan expulsando electrones al ser expuestos a luz de determinada frecuencia mínima, frecuencia conocida como *frecuencia umbral*. Para explicar este evento, Einstein consideró la luz como un torrente de partículas llamadas *fotones*; poseedores de una energía ya establecida anteriormente:

$$E = h\nu$$

El experimento de Einstein requiere de una cámara al vacío con una placa metálica en su interior, así como de un electrodo positivo. Al entrar la luz, ésta es captada por la placa metálica ocasionando el desprendimiento de los electrones, los cuales son atraídos hacia el electrodo positivo (conectado a una fuente de voltaje) y son captados por un detector de corriente capaz de registrar el flujo de electrones (Figura 2.11).

Los fotones, en el proceso del efecto fotoeléctrico, transfieren su energía a los electrones de la placa metálica para que éstos venzan las fuerzas de atracción que los mantienen unidos al metal y, además, para que el electrón logre desprenderse. La energía mínima que el electrón debe poseer para desprenderse se llama *función trabajo ( $w$ )*. Se ha observado que la intensidad de la luz depende de la cantidad de fotones que inciden en la placa metálica por unidad de tiempo y que la energía de cada fotón depende de la frecuencia de la luz.

Es posible calcular la energía cinética de un electrón expulsado de un metal durante el fenómeno del efecto fotoeléctrico con la expresión:

$$K = h\nu - w$$

Donde:

**$K$** : es la energía cinética del electrón expulsado expresada en joules.

**$h\nu$** : es la energía del fotón absorbido expresada en joules.

#### PROBLEMA TIPO:

Para un registro de rayos gamma se sabe que, a su paso por la formación, algunos de los rayos gamma presentes pierden la energía suficiente (Efecto Compton), y, eventualmente, son absorbidos por los átomos presentes en la formación liberando electrones (efecto fotoeléctrico).

“Un rayo gamma de energía 0.4 MeV que es absorbido por silicio presente en una formación arcillosa da como resultado la emisión de un electrón”. Calcule la energía cinética del electrón expulsado.

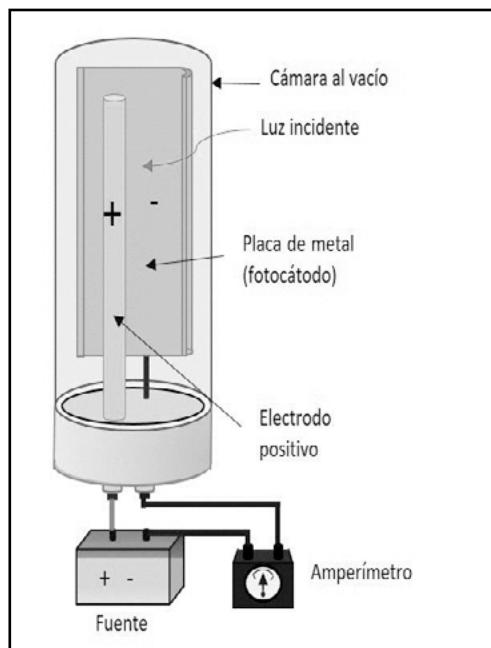


Figura 2.11. Equipo y configuración para el estudio del efecto fotoeléctrico.



Solución:

$$0.4 \text{ MeV} = 400000 \text{ eV} = 6.40870626 \times 10^{-14} \text{ J}$$

Sustituyendo la ecuación:  $E = h\nu$  en la ecuación:  $K = h\nu - w$

Resulta:  $K = E - w$

$$K = 6.40862856 \times 10^{-14} \text{ J}$$

Se obtiene la función trabajo del silicio "w" de la tabla 2.3, del efecto fotoeléctrico, ubicada en la página 15 y se sustituye en la ecuación anterior:

$$K = 6.40870626 \times 10^{-14} \text{ J} - 7.770 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$K = 6.40862856 \times 10^{-14} \text{ J}$$

w: es el trabajo necesario para "arrancar" al electrón del metal, expresado en Joules.

### PROBLEMA TIPO:

El efecto fotoeléctrico es un fenómeno que se da en los metales mediante la absorción de un fotón de cierta energía que provoca la emisión de un electrón libre; usando la energía necesaria para arrancar un electrón (función trabajo "w", ver tabla 2.3) de los siguientes metales que se encuentran presentes en las arcillas:

$$\text{Al} = 5.540 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\text{Si} = 7.770 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\text{Mg} = 5.860 \times 10^{-19} \text{ J}$$

- Calcule la frecuencia umbral de la radiación requerida para liberar electrones de cada metal presente en las arcillas.
- Calcule la energía cinética del electrón expulsado por cada metal si se usa radiación de frecuencia  $1.09 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ .

Solución:

a) si se hace  $K=0$  en la ecuación:  $K = h\nu - w$

Se tiene:  $h\nu = w$

Despejando v se obtiene:  $\nu = \frac{w}{h}$

$$\text{Para Al: } \nu = \frac{5.540 \times 10^{-19} \text{ J}}{6.62607 \times 10^{-34} \text{ J s}} = 8.361 \times 10^{14} \text{ Hz}$$

$$\text{Para Si: } \nu = \frac{7.770 \times 10^{-19} \text{ J}}{6.62607 \times 10^{-34} \text{ J s}} = 1.173 \times 10^{15} \text{ Hz}$$

$$\text{Para Mg: } \nu = \frac{5.860 \times 10^{-19} \text{ J}}{6.62607 \times 10^{-34} \text{ J s}} = 8.844 \times 10^{14} \text{ Hz}$$

b) Usando la ecuación:

$$K = h\nu - w$$

Para Al:

$$K = [(6.62607 \times 10^{-34} \text{ J s})(1.09 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}) - 5.540 \times 10^{-19} \text{ J}] = 1.682 \times 10^{-19} \text{ J}$$

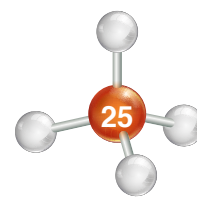
Para Si:

$$K = [(6.62607 \times 10^{-34} \text{ J s})(1.09 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}) - 7.770 \times 10^{-19} \text{ J}] = -5.476 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Para Mg:

$$K = [(6.62607 \times 10^{-34} \text{ J s})(1.09 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}) - 5.860 \times 10^{-19} \text{ J}] = 1.362 \times 10^{-20} \text{ J}$$

Observaciones: Nótese que en el inciso b) para el silicio, el resultado es negativo. Esto sucede porque la frecuencia de la luz propuesta es menor que la frecuencia umbral calculada en el inciso a) por lo tanto, ningún electrón del silicio podrá ser emitido. El efecto fotoeléctrico para el silicio no se podrá dar con la frecuencia propuesta. El efecto fotoeléctrico depende, definitivamente, de la frecuencia de la luz incidente en el metal.





Elemento	Función trabajo $w$		Frecuencia umbral $\nu$	Longitud de onda umbral $\lambda_0$
	[eV]	[J]		
Ag	4.73	$7.580 \times 10^{-19}$	$1.140 \times 10^{15}$	262
Al	4.08	$6.540 \times 10^{-19}$	$9.870 \times 10^{14}$	304
As	3.75	$6.010 \times 10^{-19}$	$9.070 \times 10^{14}$	331
Au	5.1	$8.200 \times 10^{-19}$	$1.200 \times 10^{15}$	243
Ba	2.7	$4.300 \times 10^{-19}$	$6.500 \times 10^{14}$	459
Be	4.98	$7.980 \times 10^{-19}$	$1.200 \times 10^{15}$	249
Bi	4.34	$6.950 \times 10^{-19}$	$1.050 \times 10^{15}$	286
C	5	$8.100 \times 10^{-19}$	$1.200 \times 10^{15}$	248
Ca	2.87	$4.600 \times 10^{-19}$	$6.940 \times 10^{14}$	432
Cd	4.08	$6.540 \times 10^{-19}$	$9.870 \times 10^{14}$	304
Ce	2.9	$4.700 \times 10^{-19}$	$7.000 \times 10^{14}$	428
Co	5	$8.000 \times 10^{-19}$	$1.200 \times 10^{15}$	248
Cr	4.5	$4.500 \times 10^{-19}$	$1.100 \times 10^{15}$	276
Cs	2.14	$3.430 \times 10^{-19}$	$5.170 \times 10^{14}$	579
Cu	4.7	$7.500 \times 10^{-19}$	$1.100 \times 10^{15}$	264
Fe	4.81	$7.710 \times 10^{-19}$	$1.160 \times 10^{15}$	258
Ga	4.32	$6.920 \times 10^{-19}$	$1.040 \times 10^{15}$	287
Hg	4.475	$7.170 \times 10^{-19}$	$1.082 \times 10^{15}$	277.1
K	2.29	$3.670 \times 10^{-19}$	$5.540 \times 10^{14}$	541
La	3.5	$5.600 \times 10^{-19}$	$8.500 \times 10^{14}$	354
Li	2.93	$4.690 \times 10^{-19}$	$7.080 \times 10^{14}$	423
Mg	3.66	$5.860 \times 10^{-19}$	$8.850 \times 10^{14}$	339
Mn	4.1	$6.600 \times 10^{-19}$	$9.900 \times 10^{14}$	302
Mo	4.95	$7.930 \times 10^{-19}$	$1.200 \times 10^{15}$	250
Na	2.36	$3.780 \times 10^{-19}$	$5.710 \times 10^{14}$	525
Nb	4.3	$6.900 \times 10^{-19}$	$1.000 \times 10^{15}$	288
Ni	5.35	$8.570 \times 10^{-19}$	$1.290 \times 10^{15}$	232
Os	5.93	$9.500 \times 10^{-19}$	$1.430 \times 10^{15}$	209
Pb	4.25	$6.810 \times 10^{-19}$	$1.030 \times 10^{15}$	292
Pd	5.6	$9.000 \times 10^{-19}$	$1.400 \times 10^{15}$	221
Pt	5.93	$9.500 \times 10^{-19}$	$1.430 \times 10^{15}$	209
Rb	2.261	$3.623 \times 10^{-19}$	$5.467 \times 10^{14}$	548.4
Re	4.72	$7.560 \times 10^{-19}$	$1.140 \times 10^{15}$	263
Sb	4.7	$7.500 \times 10^{-19}$	$1.100 \times 10^{15}$	262
Sc	3.5	$5.600 \times 10^{-19}$	$8.500 \times 10^{14}$	354
Se	5.9	$9.500 \times 10^{-19}$	$1.400 \times 10^{15}$	210
Si	4.85	$7.770 \times 10^{-19}$	$1.170 \times 10^{15}$	256
Sn	4.42	$7.080 \times 10^{-19}$	$1.070 \times 10^{15}$	281
Sr	2.59	$4.150 \times 10^{-19}$	$6.260 \times 10^{14}$	479
Te	4.95	$7.930 \times 10^{-19}$	$1.200 \times 10^{15}$	250
Ti	4.33	$6.940 \times 10^{-19}$	$1.050 \times 10^{15}$	286
U	3.9	$6.250 \times 10^{-19}$	$9.430 \times 10^{14}$	318
V	4.3	$6.900 \times 10^{-19}$	$1.000 \times 10^{15}$	288
W	5.22	$8.360 \times 10^{-19}$	$1.260 \times 10^{15}$	238
Zn	4.3	$6.900 \times 10^{-19}$	$1.000 \times 10^{15}$	288
Zr	4.05	$6.490 \times 10^{-19}$	$9.790 \times 10^{14}$	306

Tabla 2.3 Valores para el cálculo del efecto fotoeléctrico.

#### 2.4.4 Niels Bohr: (Primer modelo cuántico del átomo de hidrógeno)

La mayor inconsistencia del modelo atómico de Rutherford-Chadwick era que éste no sustentaba científicamente las fuerzas que mantenían al electrón girando alrededor del núcleo atómico de manera estable, ya que según la física clásica (leyes de Newton y ecuaciones de Maxwell) el núcleo atómico (cargado positivamente) debía ejercer una fuerza de atracción sobre los electrones (cargados negativamente) causando que éstos se precipitaran hacia el núcleo atómico describiendo una trayectoria en espiral destruyéndose ambos en el acto. Fue el físico danés **Niels Bohr (1885-1962)** quien trabajó sobre esta incongruencia. Se dedicó al estudio minucioso del

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

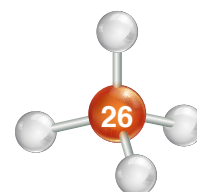
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22







comportamiento del átomo de hidrógeno y, haciendo uso de su conocimiento de la física clásica y de la teoría cuántica propuesta por Planck, llegó a su modelo atómico basado en los siguientes postulados:

- A un electrón en un átomo de hidrógeno, solo le está permitido moverse en orbitas circulares alrededor del núcleo atómico; tales orbitas se encuentran asociadas a un nivel de energía bien definido (las orbitas están cuantizadas).
- Un electrón ubicado en una órbita se encuentra en un nivel de energía permitido; por lo tanto, el electrón no irradia energía y permanece estable en dicha órbita (la energía del electrón es constante en dicha órbita).
- La energía es emitida o absorbida en cuantos de energía cuando un electrón “brinca” o “cae” de un nivel de energía permitido hacia otro.

En la concepción atómica del hidrógeno propuesta por Bohr, el núcleo atómico se encuentra ubicado en el centro y el electrón puede encontrarse en alguna de las órbitas, las cuales poseen niveles de energía bien definidos por el número cuántico “*n*”, el cual puede adoptar valores dentro del intervalo [1, 2, 3, ..., *n*]. A su vez, el electrón es capaz de “brincar” hacia órbitas de un nivel energético más elevado mediante el proceso de absorción de un fotón de energía “*hν*” por parte del átomo. Cuando el electrón cae a una órbita de un nivel energético inferior, como respuesta, el átomo emite un fotón de energía “*hν*” que representa la diferencia energética entre los niveles inicial y final (Figura 2.12). A partir de la siguiente ecuación Bohr describió la energía del electrón presente en el átomo de hidrógeno:

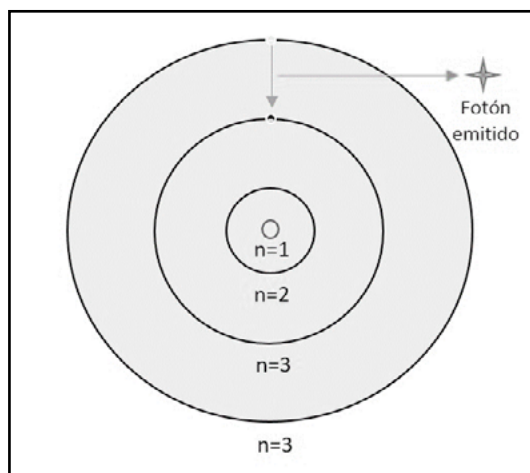


Figura 2.12. Modelo atómico de Bohr.

$$E_n = \frac{-R_H}{n^2}$$

Donde:

$R_H$ : constante de Rydberg para el átomo de hidrógeno con valor  $2.179 \times 10^{-18}$  J

*n*: es el *número cuántico principal*, el cual puede asumir únicamente valores enteros positivos.

Cuando el electrón, en el átomo de hidrógeno, se encuentra en la primera capa u órbita, se dice que el átomo se encuentra en **estado basal o fundamental**, mientras que, si se encuentra en capas superiores, se habla del átomo en **estado excitado**.

Bohr también proporcionó las ecuaciones para el cálculo de la frecuencia de emisión y absorción de fotones:

$$v_{\text{fotón emitido}} = \frac{E_i - E_f}{h}$$

$$v_{\text{fotón absorbido}} = \frac{E_f - E_i}{h}$$

Donde:

$E_i$  y  $E_f$  corresponden a la energía del electrón en sus estados inicial y final, respectivamente.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

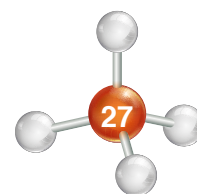
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





**PROBLEMA TIPO:**

El llamado **registro de neutrones** responde a la concentración de hidrógeno presente en las formaciones geológicas que se encuentran saturadas de hidrocarburos, así como de agua; es por ello que el hidrógeno resulta importante para obtener de manera indirecta valores de porosidad en formaciones geológicas que en un momento dado pudieran tener interés económico para su explotación.

Determine la energía de un electrón que se encuentra girando alrededor del núcleo de un átomo de hidrógeno en su estado fundamental, así como también para los niveles energéticos  $n=2$  y  $3$ :

*Solución: haciendo uso de la ecuación de Bohr para calcular la energía del electrón:*

$$E_n = \frac{-R_H}{n^2}$$

$$E_{n=1} = \frac{-2.179 \times 10^{-18} \text{ J}}{1^2} = -2.179 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$E_{n=2} = \frac{-2.179 \times 10^{-18} \text{ J}}{2^2} = -5.447 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$E_{n=3} = \frac{-2.179 \times 10^{-18} \text{ J}}{3^2} = -2.421 \times 10^{-19} \text{ J}$$

**2.4.5 Espectro electromagnético del átomo de hidrógeno**

El *espectro electromagnético* (ver anexo A, pag. A-V) es la distribución energética del conjunto de las ondas electromagnéticas; dichas radiaciones constan de un conjunto discreto de longitudes de onda. Cada longitud de onda recibe el nombre de **línea espectral**, pues de esta manera es como lo imprimen los espectrógrafos en placas fotográficas. Debido a esta característica única, es posible identificar los elementos presentes en una fuente de luz. Estos espectros son muy complicados y, generalmente, constan de centenares de líneas espectrales, por ello se analizará el espectro electromagnético más sencillo, que es el del átomo del hidrógeno, debido a que es el elemento químico más simple al poseer un solo electrón.

El espectro del hidrógeno (Figura 2.13) presenta una sucesión regular de líneas que comienza por el rojo, llegando hasta el violeta. El espacio entre líneas disminuye paulatinamente hasta el límite.

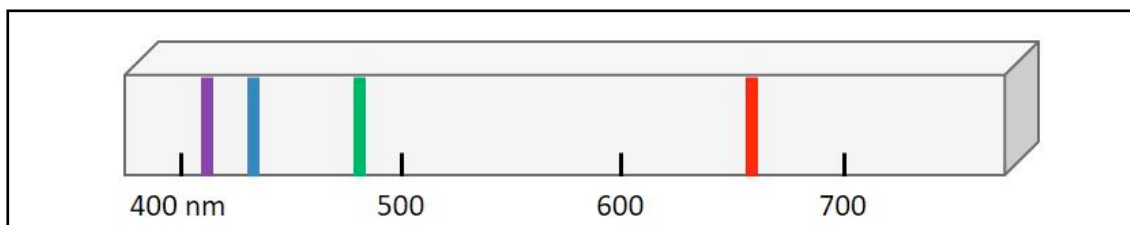


Figura 2.13. Parte visible del espectro del hidrógeno.

Muchos científicos se dieron a la tarea de estudiar el espectro del hidrógeno debido a su repetitividad y simplicidad, de esta manera fueron desarrollando expresiones empíricas que permiten calcular las longitudes de onda de las líneas espectrales del hidrógeno; la fórmula correcta fue hallada por **Johann Balmer (1825-1898)** en 1885; no obstante, con el paso del tiempo se fueron encontrando más líneas en la región del infrarrojo y del ultravioleta y de esta manera



los científicos se vieron en la necesidad de modificar la ecuación de Balmer resultando una expresión de carácter general, la cual permite calcular la longitud de onda para todas las líneas espectrales del átomo de hidrógeno. A esta expresión se le conoce como *ecuación de Rydberg*.

$$E = h\nu = R_H \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

Donde:

$R_H$ : es la constante de Rydberg que tiene el valor de:  $2.179 \times 10^{-18} \text{ J}$

$n_i$  y  $n_f$ : son números cuánticos correspondientes al estado inicial y final del electrón.

**PROBLEMA TIPO:**

Encuentre la longitud de onda de un fotón que es emitido por un átomo de hidrógeno cuando el electrón "cae" desde  $n_i = 4$  hasta  $n_f = 1$ .

Solución:

Al usar la ecuación de Rydberg:  $E = h\nu = R_H \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$

$$E = 2.179 \times 10^{-18} \text{ J} \left( \frac{1}{4^2} - \frac{1}{1^2} \right) \text{ se tiene: } E = -2.042 \times 10^{-18} \text{ J}$$

Se sabe que:  $c = \lambda\nu$  y que:  $E = h\nu$

Sustituyendo:  $\nu = \frac{E}{h}$  en  $\lambda = \frac{c}{\nu}$

Se tiene:  $\lambda = \frac{ch}{E}$

$$\lambda = \frac{\left( 3.0 \times 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}} \right) (6.62607 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})}{2.042 \times 10^{-18} \text{ J}}$$

$$\lambda = 9.734 \times 10^{-8} \text{ m} \left( \frac{1 \times 10^9 \text{ nm}}{1 \text{ m}} \right) = 97.346 \text{ nm}$$

Observaciones:

El valor de la energía  $E$  es negativo; sin embargo, es muy común expresarla como su valor absoluto ( $2.042 \times 10^{-18} \text{ J}$ ).

**2.4.6 Louis de Broglie: Naturaleza dual de la materia**

En 1924 hasta los físicos más conservadores comenzaron a aceptar la revolución de la dualidad: la luz no es sólo una onda, sino que también se comporta como partícula, como lo había establecido **Einstein** con su explicación del efecto fotoeléctrico, que le valió el premio Nobel en 1921. En 1924, **Louis de Broglie (1892-1987)** introdujo el concepto de *dualidad onda-partícula*, concepto que establece que el electrón se comporta también como onda y como partícula. De Broglie expresó este comportamiento a través del cálculo de la *longitud de onda de la partícula*, la cual se basa en las ecuaciones de Einstein y de Planck ( $E = h\nu$ ),

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

Donde:

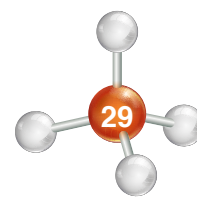
$h$ : es la constante de Planck:  $6.6207 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

$\lambda$ : es la longitud de onda asociada a la partícula

$m$ : es la masa de la partícula

$v$ : es la rapidez de la partícula

$p$ : es el momento del fotón:  $\frac{h}{\lambda} = mv$





El comportamiento ondulatorio de la materia únicamente es observable cuando se refiere a sistemas de magnitudes atómicas y subatómicas; es decir, cuando la masa es extremadamente pequeña, tal cual se puede apreciar en la ecuación de Louis de Broglie. Este comportamiento no sería apreciable a nivel macroscópico.

**PROBLEMA TIPO:**

Durante una toma de registro de rayos gamma, se obtiene evidencia del fenómeno de efecto fotoeléctrico, por medio del cual un electrón es expulsado por el silicio presente en una formación arcillosa en respuesta a que éste ha captado un fotón gamma con energía de 0.4 MeV.

Calcule la longitud de onda en Å\* del electrón emitido si se sabe que se mueve a una velocidad de  $6.25 \times 10^6$  m/s

*Solución:*

Usando la ecuación de Broglie y la masa del electrón:  $9.1024 \times 10^{-28}$  g.

\* Å (Ángstrom): Unidad de longitud, no pertenece al Sistema Internacional (SI) y tiene una equivalencia:

$$1 \times 10^{-10} \text{ m} = 1 \text{ Å}$$

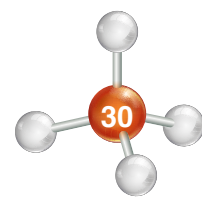
### 2.4.7 Principio de incertidumbre de Heisenberg

Las leyes de la física clásica nos han permitido estudiar y reproducir con cierto grado de exactitud varios fenómenos físicos de orden macroscópico y a su vez describirlos mediante modelos matemáticos bien definidos, pero esta disciplina se encuentra con serias limitaciones para el estudio de fenómenos de orden microscópicos, por ello, el nacimiento de la física cuántica supone un avance científico sustancial, ya que abre la posibilidad de hacer estudios más certeros en fenómenos de orden corpuscular. Fue el físico alemán **Werner Heisenberg (1901-1976)** quien enunció que el comportamiento “onda-partícula” de la materia propuesto por Louis de Broglie imponía una importante restricción en cuanto a la determinación precisa y simultánea del momento y la posición de una partícula; a este postulado se le conoce como *principio de incertidumbre*. Con la concepción de este principio, se determinó que describir perfectamente la trayectoria del electrón sobre una órbita bien definida era un error, puesto que, de esta manera, hubiera sido posible determinar la posición y momento del electrón para un instante dado, de igual modo que la física clásica lo hace en el caso de un objeto de orden macroscópico.

### 2.4.8 Mecánica cuántica: números cuánticos y orbitales atómicos

La teoría cuántica de Planck se vio enriquecida con los aportes de diversos científicos, entre ellos, el físico austriaco **Erwin Schrödinger (1887-1961)** quien, en 1926, publicó una serie de artículos que sentaron las bases de la moderna mecánica cuántica ondulatoria, en los cuales estableció en derivadas parciales su célebre ecuación diferencial, que relaciona la energía asociada a una partícula microscópica con la función de onda descrita por dicha partícula. Para ello, se basó en la hipótesis de **Louis de Broglie**.

De la solución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno se obtuvieron los llamados números cuánticos aparecen de manera natural al imponer condiciones a la frontera. El número  $n$  está relacionado con la parte radial de los distintos estados electrónicos y, por tanto, con la energía total de dichos estados, a saber:







- **2.4.8.1 Numero cuántico principal ( $n$ ):** dicho número puede adoptar valores enteros positivos en el intervalo de  $[1, 2, 3, \dots, n]$ . Así pues, corresponde al número cuántico de la ecuación de Rydberg  $E = h\nu = R_H \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$  y se puede interpretar como la descripción del tamaño y energía de las llamadas *capas o niveles energéticos*; es decir, la distancia más probable que existe entre el núcleo atómico y el electrón. El número  $n$  está relacionado con la parte radial de los distintos estados electrónicos y por tanto con la energía total de estos.
- **2.4.8.2 Número cuántico del momento angular orbital ( $l$ ):** es una constante que aparece en las funciones que resuelven la ecuación de Shödinger. Cada una de estas funciones está asociada con un estado electrónico. El cuadrado de la parte angular de esas funciones está relacionado con la probabilidad de encontrar el electrón en distintas direcciones (distintos ángulos) y este número cuántico se puede interpretar físicamente como la forma de los *orbitales atómicos*. Donde " $l$ " puede adoptar valores enteros en el intervalo que va desde "0" hasta  $(n - 1)$  para cada valor conocido de " $n$ ". En otras palabras, los valores que puede adoptar " $l$ " dependen directamente del valor que adopte el número cuántico principal " $n$ ", en la tabla 2.4 se indican los valores posibles para  $l$  y la letra asociada, de acuerdo con la siguiente expresión:

$$l = (n - 1)$$

Valor de ( $l$ )	0	1	2	3	4	5
Nombre del orbital	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	<i>h</i>

Tabla 2.4. Valores del número cuántico " $l$ " y su correspondiente orbital.

- **2.4.8.3 Número cuántico magnético ( $m_l$ ):** este número cuántico puede adoptar valores positivos o negativos y describe físicamente la orientación espacial del orbital atómico. El valor de  $m_l$  se encuentra en función del número cuántico del momento angular " $l$ " y se sabe que, para cada valor de " $l$ ", existen  $(2l + 1)$  valores de " $m_l$ " que corresponden al número de orbitales presentes en una *subcapa energética* con cierto valor " $l$ ". En conclusión, los valores posibles para " $m_l$ " están dentro del siguiente intervalo:

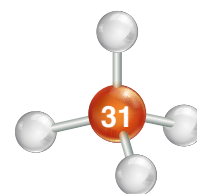
$$0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \pm l$$

- **2.4.8.4 Número cuántico del espín del electrón ( $m_s$ ):** este número describe el sentido del giro que mantiene el electrón sobre su propio eje y a su vez explica el origen del comportamiento magnético asociado al electrón. Este número cuántico adopta únicamente dos valores:

$$+\frac{1}{2} \text{ o } -\frac{1}{2}$$

### 2.4.9 Principio de Exclusión de Wolfgang Pauli

El orbital ocupado por un electrón está descrito en función de los primeros tres números cuánticos  $(n, l, m_l)$ , es decir, dos electrones pueden tener estos tres números cuánticos iguales, pero los valores que adopta el número cuántico del espín debe ser distinto para cada electrón, pudiendo ser  $+\frac{1}{2}$  o  $-\frac{1}{2}$ . Esta condición se encuentra estrechamente ligada a la capacidad que tiene un orbital para albergar electrones que es de dos electrones como máximo por cada orbital. Este principio se le atribuye al científico **Wolfgang Pauli (1900-1958)**.





Es indispensable que se profundice en la explicación de la manera en que son utilizados los números cuánticos, debido a que en temas subsecuentes será de gran importancia que se entienda, tanto conceptual como empíricamente, su uso, el cual ayudará a comprender el origen y uso de la llamada *configuración electrónica de los elementos químicos*.

Con base en las Tablas 2.5 y 2.6 es posible observar lo siguiente:

- $l = 0, (2l + 1) = 1$ , para este caso solo existe un valor posible para  $m_l$  que corresponde al de un orbital del tipo  $s$ .
- $l = 1, (2l + 1) = 3$ , del mismo modo se sabe que para este caso existen tres valores posibles para  $m_l$ , lo cual implica la existencia de tres orbitales del tipo  $p$  ( $p_x, p_y, p_z$ ).
- $l = 2, (2l + 1) = 5$ , análogamente se encuentran cinco valores posibles para  $m_l$ , es decir cinco orbitales del tipo  $d$  ( $d_{xy}, d_{yz}, d_{xz}, d_{x^2-y^2}, d_{z^2}$ )

$n$	$l$	$m_l$	No de orbitales	Tipo de orbitales atómicos
1	0	0	1	1s
2	0	0	1	2s
	1	-1,0,1	3	2p <sub>x</sub> , 2p <sub>y</sub> , 2p <sub>z</sub>
3	0	0	1	3s
	1	-1,0,1	3	3p <sub>x</sub> , 3p <sub>y</sub> , 3p <sub>z</sub>
	2	-2,-1,0,1,2	5	3d <sub>xy</sub> , 3d <sub>yz</sub> , 3d <sub>xz</sub> , 3d <sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> , 3d <sub>z<sup>2</sup></sub>
...	...	...	...	...

Tabla 2.5. Tipos de orbitales atómicos en función de los primeros 3 números cuánticos.

Subcapa electrónica	Cantidad de orbitales	Capacidad electrónica de la subcapa
s	1	2
p	3	6
d	5	10
f	7	14

Tabla 2.6. Capacidad de ocupación electrónica por subcapa.

Este comportamiento también es observable en la Figura 2.14 donde son presentados los posibles niveles energéticos para un átomo cualquiera y la estructura del átomo aportada por Schrödinger.

Hasta aquí han sido descritas las energías asociadas a los orbitales atómicos, pero es importante mencionar que la ubicación espacial del electrón dentro del átomo también se encuentra referenciada a la *función de onda*, por ello, se indicarán las representaciones físicas de los orbitales atómicos con la finalidad de ayudar a

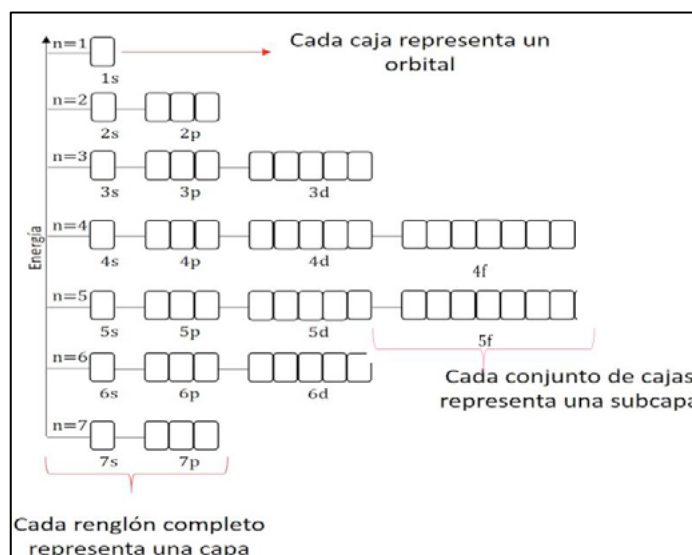
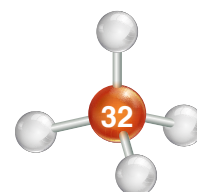


Figura 2.14. Posibles niveles de energía (capas energéticas) para un átomo cualquiera.





comprender y a visualizar la distribución de los electrones alrededor del núcleo atómico.

### 2.4.9.1 Orbitales atómicos del tipo "s"

Se debe considerar como antecedente la capacidad que tiene un orbital cualquiera para albergar como máximo dos electrones; en el caso de los orbitales atómicos del tipo "s" se conoce su geometría y tamaño. Dicha geometría es esférica y resulta de una función de probabilidad radial que se encuentra en función de la magnitud del número cuántico principal "n" (Figura 2.15).

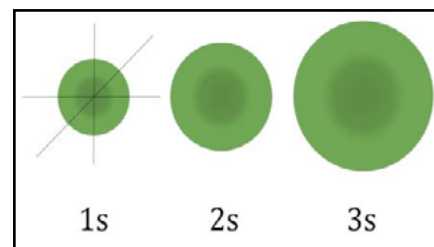


Figura 2.15. Geometría de los orbitales tipo "s" en función de "n".

### 2.4.9.2 Orbitales atómicos del tipo "p"

De manera análoga, se sabe que los orbitales atómicos del tipo "p" comienzan a aparecer a partir del número cuántico "n = 2", y cuentan con una geometría espacial del tipo bilobulada resultado de su propia distribución de probabilidad. Existen tres tipos de orbitales atómicos del tipo p = (p<sub>x</sub>, p<sub>y</sub>, p<sub>z</sub>) en cada subcapa energética del tipo "p"; estos se encuentran orientados hacia los ejes coordenados (x, y, z) (Figura 2.16).

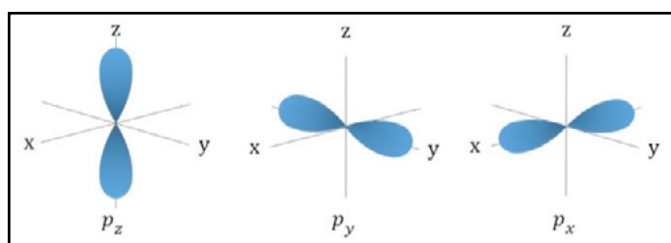


Figura 2.16 Geometría de los orbitales atómicos del tipo "p".

### 2.4.9.3 Orbitales atómicos del tipo "d"

Los orbitales atómicos del tipo "d", comienzan con el número cuántico n = 3, y se sabe que es posible encontrar cinco tipos de ellos en cada subcapa atómica del tipo "d = d<sub>yz</sub>, d<sub>xz</sub>, d<sub>xy</sub>, d<sub>(x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup>)</sub>, d<sub>z<sup>2</sup></sub>". Como se puede observar, cuatro de ellos poseen una misma geometría con diferente orientación espacial, mientras que uno de ellos posee una forma bastante peculiar; a pesar de ello, los cinco poseen características energéticas idénticas. (Figura 2.17).

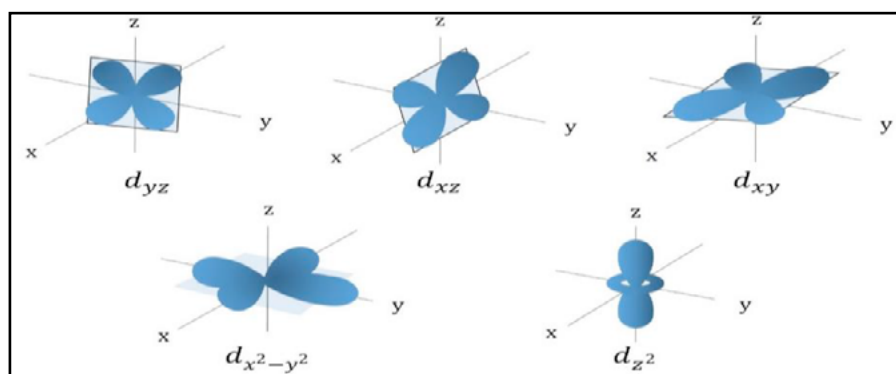


Figura 2.17. Representación física de los orbitales tipo "d".

### 2.4.9.4 Orbitales atómicos del tipo "f"

Existen orbitales de diferente geometría y características a los anteriormente mencionados. Dichos orbitales son nombrados orbitales atómicos del tipo "f" y la representación de su geometría resultaría muy complicada. La importancia de estos orbitales recae en que ayudan a explicar el

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

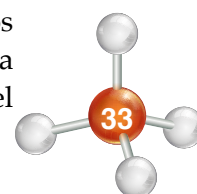
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





comportamiento de aquellos elementos químicos con número atómico mayor a 57 (ver tabla completa de las formas del orbital en el apéndice A).

### 2.4.9.5 Distribución electrónica en los átomos

Una vez que se está familiarizado con la geometría y tamaño de los orbitales atómicos, es factible conocer las energías asociadas a los mismos, con la finalidad de comprender la manera en la que los electrones adquieren su distribución dentro del átomo. Para ello es necesario conocer el diagrama energético para átomos multielectrónicos, en los cuales, la energía de los electrones depende de sus respectivos números cuánticos de momento angular " $m_l$ ", así como de su número cuántico principal " $n$ ".

Como es posible observar en la Figura 2.18, el diagrama representado dicta el orden de llenado electrónico de los orbitales atómicos, de esta manera se establece el llamado **Principio de construcción**, mismo que se expresa con la siguiente notación simplificada:

$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p$

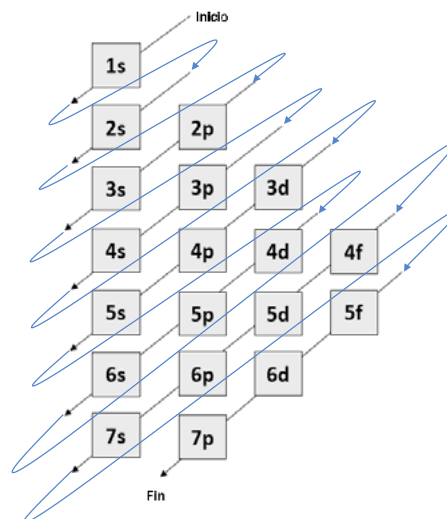


Figura 2.18. Orden de llenado de las subcapas.

### 2.4.10 Principio de máxima multiplicidad de Hund

En 1927 el físico alemán **Friedrich Hund (1896-1997)** formuló un principio empírico que establece que cuando los electrones van ocupando los orbitales atómicos de una subcapa electrónica, tienden a hacerlo de manera individual hasta que ocurre el primer apareamiento de electrones en un mismo orbital. Este principio es conocido como **Regla de Hund**.

Para la correcta comprensión y adecuada aplicación de la Regla de Hund, se ilustran tres métodos (notaciones) en la Figura 2.19. Estos métodos sirven para representar las configuraciones electrónicas de los llamados **átomos multielectrónicos**.

Configuración electrónica		
Notación spdf (condensada):	C	$1s^2 2s^2 2p^2$
Notación spdf (expandida):	C	$1s^2 2s^2 2p_x^1 p_y^1 p_z^0$
Diagrama de orbitales:	C	

Figura 2.19 Distintas notaciones para la configuración electrónica.

Para el átomo de carbono con seis electrones, la **notación condensada spdf** ordena los electrones de la siguiente manera: dos electrones se encuentran en la subcapa electrónica **1s**, dos electrones en la subcapa electrónica **2s**, dos más en la subcapa electrónica **2p**. La notación condensada únicamente indica el número total de los electrones en cada subcapa electrónica, pero no precisa la distribución de los mismos entre los orbitales de igual energía.

En la **notación expandida spdf** para el átomo de carbono, se toma en cuenta la regla de Hund durante la asignación de los dos últimos electrones en la subcapa electrónica **2p**, en donde los dos electrones ocupan 2 de los 3 orbitales **2p** permaneciendo desapareados y dejando el tercer orbital vacío.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

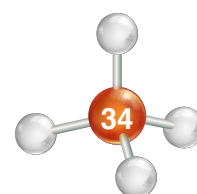
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





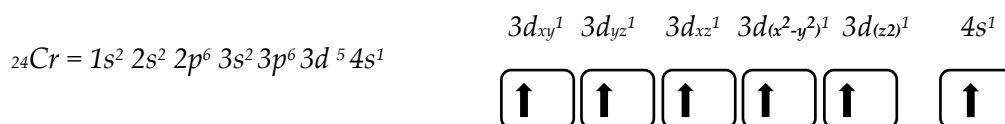


En el **diagrama de orbitales**, las flechas indican el espín del electrón, siendo la flecha que apunta hacia arriba un espín  $+\frac{1}{2}$ , y la flecha que apunta hacia abajo un espín  $-\frac{1}{2}$  conforme a la regla de Hund, se entiende que los electrones que se encuentran en los orbitales donde se esquematiza una flecha que apunta hacia arriba junto a una que apunta hacia abajo se encuentran apareados, mientras que una flecha solitaria que apunta hacia arriba indica que el electrón correspondiente se encuentra desapareado (en el apéndice A, se muestra una tabla con los valores de los cuatro números cuánticos de los electrones diferenciales pertenecientes a los 36 primeros elementos de la tabla periódica).

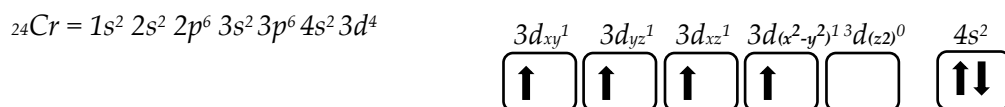
### 2.4.11 Excepciones de la configuración electrónica

Pueden presentarse las siguientes excepciones al principio de construcción, dado que el átomo por naturaleza busca su mayor estabilidad. En ciertos casos especiales, como el del cromo, el orden de llenado cambia y para explicarlo es necesario el uso de un diagrama de orbitales.

- **Configuración electrónica correcta del cromo (mayor estabilidad energética)**



- **Configuración electrónica incorrecta del cromo**



Los átomos siempre tratan de alcanzar estados de mayor estabilidad. En este caso, se observa que el átomo de cromo obtiene la mayor estabilidad cuando se llenan a la mitad dos de sus subcapas electrónicas finales; esto difiere del orden de llenado electrónico conocido como **principio de construcción** en el cual se llena una subcapa 4s dejando incompleta la mitad de la última subcapa 3d como se ilustra en el caso incorrecto.

#### PROBLEMA TIPO:

Se conoce desde el siglo XVI que existe un pequeño campo magnético permanente en la superficie terrestre. Se considera que esto se debe a las corrientes eléctricas generadas en el núcleo de la tierra por la existencia de silicatos de hierro, de magnesio y de calcio líquidos, que contienen una conductividad eléctrica apreciable a altas temperaturas, asociadas con corrientes de convección, causadas por fuentes termoquímicas y/o radiactivas.

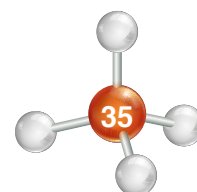
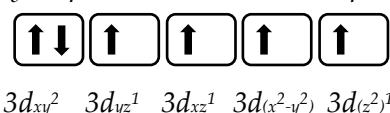
Escriba las configuraciones electrónicas del magnesio ( $Z=12$ ), del calcio ( $Z=20$ ) y del hierro ( $Z=26$ ), indique el número de electrones desapareados que tiene cada uno de ellos.

*Solución:*

${}_{12}\text{Mg} = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ ; tiene 2 electrones de valencia y no presenta electrones desapareados

${}_{20}\text{Ca} = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$ ; tiene 2 electrones de valencia y no presenta electrones desapareados

${}_{26}\text{Fe} = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$





Observaciones:

Como es posible observar, el Fe presenta cuatro electrones desapareados en la subcapa 3d.

Solución:

a) Numero de electrones = 27

Numero de protones = 27

Numero de neutrones = 33

b)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$

c)  $1.17 \text{ MeV} \left( \frac{1 \times 10^6 \text{ eV}}{1 \text{ MeV}} \right) \left( \frac{1.6 \times 10^{-19} \text{ J}}{1 \text{ eV}} \right) = 1.872 \times 10^{-13} \text{ J}$

$1.33 \text{ MeV} \left( \frac{1 \times 10^6 \text{ eV}}{1 \text{ MeV}} \right) \left( \frac{1.6 \times 10^{-19} \text{ J}}{1 \text{ eV}} \right) = 2.128 \times 10^{-13} \text{ J}$

### PROBLEMA TIPO:

Durante la evaluación del potencial en yacimientos petroleros son estudiados 3 aspectos clave: la permeabilidad, la porosidad y la saturación de hidrocarburos: La porosidad es definida como el espacio intersticial volumétrico existente en la roca que se encuentra ocupado por fluidos; la porosidad como la capacidad que tiene una roca de almacenar fluidos; y la saturación es la fracción del volumen poroso de una roca que está ocupada por algún fluido.

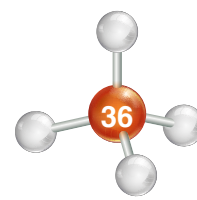
Una técnica empleada para estimar la porosidad consiste en la utilización de rayos de energía intermedia, los cuales, al chocar con los electrones presentes en la formación porosa, pierden energía y se dispersan después de sucesivos choques. El número de choques se relaciona con el número de electrones por unidad de volumen de la muestra, conocido como *densidad de electrones*. La densidad de electrones, para la mayoría de los minerales y fluidos que se encuentran en los yacimientos petroleros, es directamente proporcional a la densidad volumétrica del material.

Una fuente de rayos gamma es el cobalto-60, y el  $\text{Co}^{60}$  un isótopo del cobalto. Este isótopo produce rayos gamma con energías de 1.11 MeV y 1.33 MeV, respectivamente. Si el número atómico del  $\text{Co}^{60}$  es 27 determine:

- El número de electrones, el número de protones y el número de neutrones que posee dicho isótopo.
- La configuración electrónica.
- Las energías de los dos rayos gamma en Joules.

## 2.5 Propiedades magnéticas de las sustancias

Las propiedades magnéticas de las sustancias son resultado del ordenamiento electrónico y de la asignación del número cuántico del spin del electrón " $m_s$ ". Dicho ordenamiento electrónico obedece al principio de exclusión de Pauli, el cual restringe la asignación del cuarto número cuántico " $m_s$ " para un electrón dentro de un orbital atómico.





De acuerdo con sus propiedades magnéticas, las sustancias se clasifican en:

- **Sustancias Diamagnéticas:** son aquellas que presentan una ligera repulsión frente a un campo magnético externo, debido a que, en su configuración electrónica, todos sus electrones se encuentran apareados; es decir, los campos magnéticos individuales correspondientes a sus electrones se encuentran cancelados. Debido a la débil repulsión que presentan en presencia de campos magnéticos se afirma que son débilmente magnéticas.
- **Sustancias Paramagnéticas:** éstas experimentan un efecto de atracción en presencia de un campo magnético debido a que poseen electrones desapareados, los cuales no cancelan mutuamente sus campos magnéticos.
- **Sustancias Ferromagnéticas:** esta propiedad corresponde a un caso especial del paramagnetismo ya que la influencia magnética que experimentan dichas sustancias es mucho más intensa que en el caso de las sustancias paramagnéticas comunes. Esto se debe a que los electrones de las sustancias (Fe, Co, Ni) se encuentran desapareados y son fuertemente influenciados por la presencia de campos magnéticos que pueden alinearse permanentemente a los campos mismos, es decir, son susceptibles de ser magnetizados.

En la Figura 2.20 se esquematiza el comportamiento de los electrones en las sustancias paramagnéticas y ferromagnéticas:

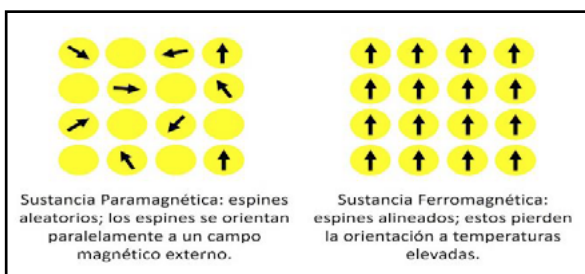


Figura 2.20. Comportamiento natural de las sustancias paramagnéticas y ferromagnéticas.

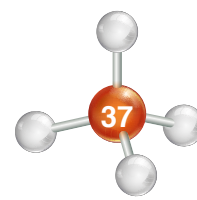
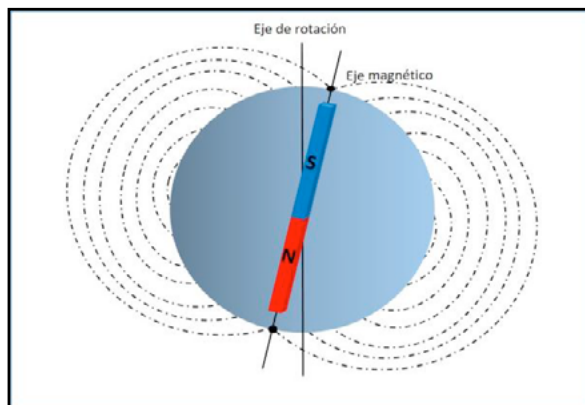
## 2.6 Aplicaciones de las propiedades magnéticas de las sustancias en las Ciencias de la Tierra

Durante siglos han sido estudiadas las propiedades magnéticas de las sustancias. Actualmente existen diversas aplicaciones del magnetismo en la vida cotidiana: desde el uso de un disco duro de computadora, hasta el simple movimiento de un motor de inducción de corriente alterna en una licuadora. En esta sección serán presentadas algunas de las aplicaciones de las propiedades magnéticas de las sustancias. No se agotan todas las posibilidades, por supuesto, empero sí se refiere a las más recurrentes en la vida del profesional en Ciencias de la Tierra.

### 2.6.1 Comportamiento magnético de la Tierra

Permanentemente la Tierra ha experimentado un comportamiento magnético cuyo origen no se conoce con exactitud. Este comportamiento acusa la existencia de dos polos magnéticos terrestres, los cuales no se encuentran alineados a los polos geográficos, conocidos por su orientación con el eje de rotación terrestre; a esta discrepancia angular se le conoce como *declinación magnética*, la cual aparece representada en la Figura 2.21.

Figura 2.21. Esquematización del campo magnético terrestre y su declinación respecto al eje de rotación de la Tierra.





El campo magnético terrestre, es atribuido al contacto físico entre el núcleo interno terrestre de composición metálica, con el flujo constante y dinámico del material fundido que constituye al núcleo externo terrestre. Este comportamiento se asemeja al de un dínamo, ya que, al generar termoelectricidad natural debido al contacto entre estas dos capas terrestres, también se autoinduce un campo magnético debido a la fricción y al movimiento.

Las sustancias ferromagnéticas son susceptibles de magnetización. En el caso de las rocas, esta magnetización sucede en aquéllas que poseen un alto contenido en minerales ferromagnéticos y de esta manera la influencia del magnetismo terrestre queda grabada en las rocas de origen ígneo, debido a que, durante su consolidación, su temperatura cambia súbitamente; es decir, pasan de tener temperaturas muy altas a temperaturas ambiente. Este proceso de magnetización en las rocas es de carácter permanente, a no ser que la roca sea expuesta a la influencia de un campo magnético distinto de igual o mayor intensidad que el original o que la roca sufra un calentamiento extremo.

**PROBLEMA TIPO:**

Se entiende por *declinación magnética* para un punto dado de la Tierra, el ángulo formado entre el norte magnético local y el norte geográfico; en otras palabras, es la diferencia entre el norte geográfico y el indicado por una brújula (norte magnético). La *declinación magnética* varía según el lugar y con el paso del tiempo.

Determine la declinación magnética para el año 2016 de la carta topográfica del INEGI "Coatzintla" con clave F14D75.

En la leyenda de la carta se puede leer que la declinación magnética para 1990 fue de 7°00' y la variación magnética anual es de 4'.

*Solución:*

La *variación anual* es de 4' entonces:

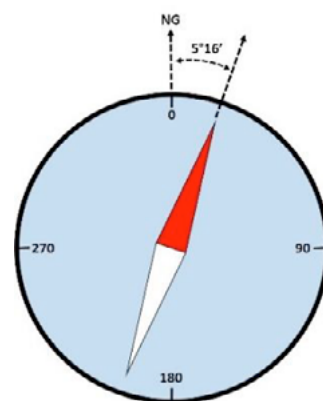
$$2016-1990 = 26 \text{ años} \qquad (26 \text{ años}) \left( \frac{4'}{\text{años}} \right) = 104'$$

Si la declinación era de 7°00' al Este y la variación magnética es hacia el Oeste entonces:  $(7^{\circ}00') - (1^{\circ}44') = 5^{\circ}16'$

La declinación magnética para la carta Coatzintla es de 5°16'' para el año 2016.

*Observaciones:*

La posición del norte magnético no coincide exactamente con el norte geográfico, y se mueve permanentemente. En la actualidad el norte magnético varía su posición unos 60 km por año.

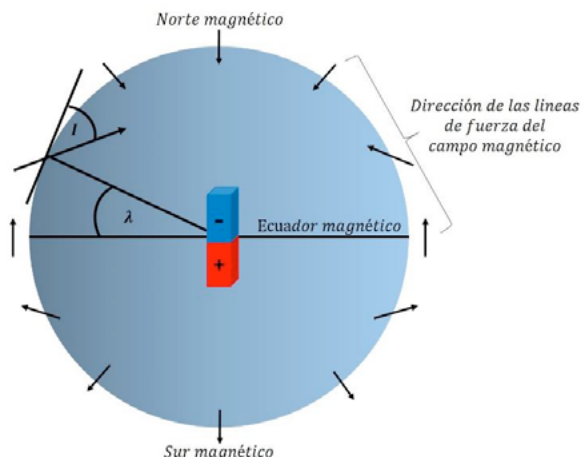






**PROBLEMA TIPO:**

Se conoce como *inclinación magnética* de un determinado lugar, al ángulo "I" que forma el campo magnético terrestre (aguja magnética de la brújula) en una determinada latitud ( $\lambda$ ) con el plano horizontal.



La expresión que relaciona la inclinación magnética con la latitud terrestre se expresa mediante las siguientes ecuaciones:

$$I = \text{Tan}^{-1}\{2 \text{Tan } \lambda\}$$

$$\lambda = \text{Tan}^{-1}\left(\frac{\text{Tan } I}{2}\right)$$

Determine la inclinación magnética de la carta topográfica del INEGI "Venustiano Carranza" con clave F14D64.

En la carta se puede leer la latitud terrestre ( $\lambda$ ) del lugar que es de: 20°30'

*Solución:*

Se sustituye la latitud de la ubicación de la carta topográfica en la expresión:

$$I = \text{Tan}^{-1}\{2 \text{Tan } \lambda\}$$

$$I = \text{Tan}^{-1}\{2 \text{Tan } 20.5\}$$

$$I = 36.78^\circ$$

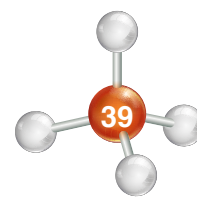
**2.7 Autoevaluación**

**Cuestionario de autoevaluación del Capítulo 2**

**Cuestionario de autoevaluación del tema 2.2**

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

- Filósofo griego quien acuñó el término "átomo" y lo consideró una partícula pequeña e indivisible constitutiva de la materia.
  - Aristóteles
  - Demócrito
  - Sócrates.
  - Platón
- Científico inglés considerado como el padre de la teoría atómica, de la cual sentaría las bases en el año de 1808.
  - J.J. Thomson
  - Robert Millikan
  - James Chadwick
  - John Dalton



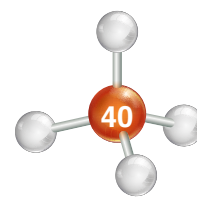


3. Radiación electromagnética de naturaleza negativa producida dentro de un tubo de vacío y que tiene su origen en el cátodo y describe una trayectoria recta hacia el ánodo.  
a) Rayos X      b) Partículas  $\alpha$       c) Rayos catódicos      d) Rayos gamma
4. Científico conocido por calcular la carga electrónica, en el año de 1909, a partir de su experimento de las "gotas de aceite".  
a) James Clerk Maxwell      b) Robert Millikan      c) J.J. Thomson      d) Michael Faraday
5. Características fundamentales del modelo atómico propuesto por Thomson en 1904:  
a) Los átomos contienen electrones y son eléctricamente neutros.  
b) Los átomos radiactivos emiten radiación electromagnética espontánea.  
c) Los átomos poseen protones y neutrones.  
d) Los átomos cuentan con un denso conglomerado central llamado núcleo alrededor del cual se encuentran los electrones moviéndose en orbitas bien definidas.
6. Valor de la relación  $\frac{\text{carga del electrón}}{\text{masa}}$  hallada por Thomson.  
a)  $9.1094 \times 10^{-28} g$       b)  $-1.76 \times 10^8 \frac{C}{g}$       c)  $-1.6022 \times 10^{-19} C$       d)  $1.6022 \times 10^{-19} C$
7. Científico que propuso el modelo atómico conocido popularmente como el *modelo atómico del pudín con pasas*.  
a) J.J. Thomson      b) Ernest Rutherford      c) Robert Millikan      d) James Chadwick
8. Experimento que consistió en observar la manera en que los campos eléctricos y magnéticos influían en la trayectoria de los rayos catódicos.  
a) Experimento de Dalton      b) Experimento de Millikan  
c) Experimento de Thomson      d) Experimento de Faraday
9. Científico a quien se le atribuye el cálculo de la masa del electrón:  
a) Max Planck      b) John Dalton      c) Robert Millikan      d) James Chadwick
10. Partícula cuya masa es aproximadamente 1 800 veces más pequeña que el átomo de hidrógeno:  
a) Neutrón      b) Protón      c) Partícula  $\alpha$       d) Electrón

### Questionario de autoevaluación del tema 2.3

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

1. Científico que descubrió, en 1896, la radiactividad, al estudiar las propiedades fluorescentes de las sustancias.  
a) Pierre Curie      b) Paul Villard      c) Henri Becquerel      d) Wilhelm Röntgen
2. Descubrimiento hecho por Wilhelm Röntgen, en 1895, como consecuencia de la interacción de los rayos catódicos con sustancias como el cobre, hierro o cromo.  
a) Rayos  $\alpha$       b) Rayos  $\beta$       c) Rayos  $\gamma$       d) Rayos X
3. Radiación electromagnética descubierta por Rutherford, cuya carga eléctrica consta de dos cargas eléctricas fundamentales positivas (2+).





- a) Rayos  $\alpha$                       b) Rayos catódicos                      c) Rayos  $\beta$                       d) Rayos canales
4. Radiación electromagnética descubierta por Paul Villard, en 1900, cuya naturaleza es descrita como una radiación de muy alta energía con un poder de penetración muy elevado.  
a) Rayos  $\gamma$                       b) Rayos  $\beta$                       c) Rayos X                      d) Rayos Catódicos
5. Científico que identificó el llamado decaimiento radiactivo y abolió la idea de la indivisibilidad del átomo propuesta por Demócrito y reafirmada por Dalton en 1808.  
a) Wilhelm Röntgen                      b) J.J. Thomson                      c) Paul Villard                      d) Ernest Rutherford
6. Partícula subatómica ubicada en el núcleo atómico, según los experimentos de Rutherford.  
a) Electrón                      b) Protón                      c) Neutrón                      d) Mesón
7. Científico que bombardeó una laminilla de berilio con partículas alfa y encontró indicios de la partícula que hoy conocemos como neutrón.  
a) J.J. Thomson                      b) Ernest Rutherford                      c) Röntgen                      d) James Chadwick
8. Primer modelo atómico que considera la existencia de un denso conglomerado central llamado núcleo.  
a) Modelo atómico de Thomson                      b) Modelo atómico de Rutherford-Chadwick  
c) Modelo atómico de Dalton                      d) Modelo atómico de Rutherford
9. Representación gráfica de una propiedad de la roca contra la profundidad.  
a) Datación radiométrica                      b) Registros de producción  
c) Registros geofísicos de pozos                      d) Gravimetría
10. Propiedad de la roca definida como la fracción del volumen poroso que es ocupado por fluidos tales como agua, aceite y gas.  
a) Saturación de fluidos                      b) Porosidad                      c) Porosidad efectiva                      d) Litología
11. Elemento de un equipo de toma de registros de pozos encargado de censar los parámetros de interés en la roca.  
a) Computadora                      b) Herramienta                      c) Cable                      d) Malacate
12. Registro cuya función primordial es medir la radiactividad natural de las rocas, su correcta interpretación y permite identificar litologías a lo largo del pozo.  
a) Registro de emisión de neutrones                      b) Registros geofísicos de pozos  
c) Registro de potencial natural                      d) Registro de rayos gamma naturales
13. Registro usado para conocer de manera indirecta la porosidad de las rocas y, de manera cualitativa, el tipo de fluido entrampado en las mismas.  
a) Registros geofísicos de pozos                      b) Registros eléctricos  
c) Registro de emisión de neutrones                      d) Registros radiactivos
14. Naturaleza macroscópica de la composición mineral, textura, color y granulometría de las rocas.  
a) Litología                      b) Porosidad                      c) Saturación de fluidos                      d) Porosidad efectiva

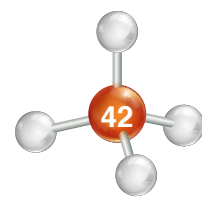


15. Fracción del volumen de roca que es ocupado por los fluidos.  
a) Litología    b) Porosidad efectiva    c) Saturación de fluidos    d) Porosidad

### Cuestionario de autoevaluación del tema 2.4

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

- Modelo atómico que mejor se ajusta al comportamiento real de la materia, ya que describe la configuración de las partículas subatómicas fundamentales dentro del átomo.  
a) Modelo de Rutherford-Chadwick    b) Modelo de la mecánica cuántica  
c) Modelo de Thomson    d) Modelo de Rutherford
- Nombre de la emisión y transmisión de energía en forma de ondas electromagnéticas.  
a) Amplitud de onda    b) Longitud de onda.  
c) Frecuencia de onda    d) Radiación electromagnética
- Propiedad definida como la distancia horizontal entre dos crestas consecutivas de una onda.  
a) Rapidez    b) Frecuencia de onda    c) Amplitud de onda    d) Longitud de onda
- Elementos capaces de absorber toda energía electromagnética que incide sobre ellos respondiendo con la emisión de una radiación electromagnética que consta de una amplia variedad de longitudes de onda (luz).  
a) Cuerpos negros    b) Fotones    c) Electrones    d) Elementos radiactivos
- Científico que desarrolló la llamada **teoría cuántica ondulatoria**.  
a) Wilhelm Röntgen    b) James Chadwick    c) James c. Maxwell    d) Max Planck
- Cantidad mínima de energía que los átomos pueden emitir o absorber y cuya expresión matemática es  $E = h\nu$ .  
a) Corpúsculo    b) Electrón    c) Cuanto    d) Carga electrónica
- Fenómeno que sucede cuando ciertos metales reaccionan expulsando electrones al ser expuestos a luz de determinada frecuencia.  
a) Efecto fotoeléctrico    b) Radiación electromagnética  
c) Radiactividad natural    d) Espectro electromagnético
- Científico que describió a la luz como un torrente de partículas a las cuales llamó **fotones**.  
a) Louis de Broglie    b) Niels Bohr    c) Albert Einstein    d) James C. Maxwell
- Físico danés que, con base en el estudio del átomo de hidrógeno, propuso su modelo atómico, el cual consta de órbitas circulares, asociadas a un determinado nivel energético.  
a) Niels Bohr    b) Frederick Soddy  
c) Louis de Broglie    d) Erwin Schrödinger
- Distribución energética del conjunto de las ondas electromagnéticas.  
a) Líneas espectrales    b) Radiación electromagnética  
c) Radiación de onda corta    d) Espectro electromagnético



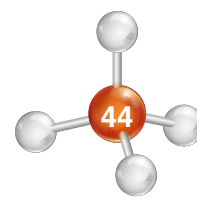




11. Ecuación que permite calcular la longitud de onda para todas las líneas espectrales del átomo de hidrógeno.  
a) Ec. de Rydberg    b) Ec. de Balmer    c) Ec. de Maxwell    d) Ec. de Einstein
12. Científico que introdujo, en 1924, el concepto revolucionario de la *dualidad onda-partícula*.  
a) James Chadwick    b) Erwin Schrödinger    c) Albert Einstein    d) Louis de Broglie
13. Científico creador del *principio de incertidumbre*, el cual enuncia que el comportamiento “onda-partícula” de la materia impone una importante restricción a la determinación precisa y simultánea del momento y la posición de una partícula.  
a) Louis de Broglie    b) Werner Heisenberg  
c) Wolfgang Pauli    d) Friedrich Hund
14. Científico que aportó una concepción moderna de la geometría y naturaleza del átomo a través de una ecuación con la que nacería la *mecánica cuántica ondulatoria*.  
a) Wolfgang Pauli    b) Erwin Schrödinger  
c) Friedrich Hund    d) Werner Heisenberg
15. Número cuántico que describe el tamaño y energía de las llamadas *capas energéticas* o *niveles energéticos*; es decir, la distancia más probable entre el núcleo atómico y el electrón.  
a)  $m_s$     b)  $m_l$     c)  $n$     d)  $l$
16. Número cuántico responsable de las características magnéticas de las sustancias.  
a)  $m_s$     b)  $m_l$     c)  $n$     d)  $l$
17. Número cuántico que puede adoptar valores positivos o negativos y describe físicamente la orientación espacial del orbital atómico.  
a)  $m_s$     b)  $m_l$     c)  $n$     d)  $l$
18. Principio que dicta que dos electrones no pueden tener sus cuatro números cuánticos iguales.  
a) Principio de máxima multiplicidad    b) Principio de exclusión de Pauli  
c) Principio de incertidumbre de Heisenberg    d) Principio de Planck
19. Subcapas electrónicas cuyos orbitales atómicos cuentan con una geometría espacial del tipo bilobulada, resultado de su propia distribución de probabilidad.  
a) Subcapa electrónica tipo d    b) Subcapa electrónica tipo g  
c) Orbitales atómicos tipo s    d) Subcapa electrónica tipo p
20. Orbitales atómicos, resultado de una distribución de probabilidad espacial radial.  
a) Subcapa electrónica tipo d    b) Orbitales atómicos tipo s  
c) Orbitales atómicos tipo d    d) Subcapa electrónica tipo p
21. Subcapa electrónica que cuenta con cinco orbitales atómicos.  
a) Subcapa electrónica tipo d.    b) Subcapa electrónica tipo f.  
c) Subcapa electrónica tipo g.    d) subcapa electrónica tipo p
22. Regla empírica que establece que cuando los electrones van ocupando los orbitales atómicos de una subcapa electrónica, tienden a hacerlo de manera individual hasta que ocurre el primer apareamiento de electrones en un mismo orbital.  
a) Principio de máxima multiplicidad    b) Principio de exclusión de Pauli  
c) Principio de incertidumbre de Heisenberg    d) Principio de Planck



23. Notación que únicamente indica el número total de los electrones en cada subcapa electrónica, pero no precisa la distribución de los mismos entre los orbitales de igual energía.
- a) Notación de diagrama de orbitales      b) Notación condensada  
c) Notación expandida      d) Notación spdf
24. Notación que indica el espín del electrón, siendo la flecha que apunta hacia arriba un espín  $+\frac{1}{2}$ , y la flecha que apunta hacia abajo un espín  $-\frac{1}{2}$ .
- a) Notación de diagrama de orbitales.      b) Notación condensada  
c) Notación expandida      d) Notación spdf
25. Sustancias que presentan una ligera repulsión magnética en presencia de un campo magnético debido a que, en su configuración electrónica, todos sus electrones se encuentran apareados.
- a) Paramagnéticas      b) Ferromagnéticas      c) Diamagnéticas      d) Magnetizables
26. Sustancias que presentan un débil efecto de atracción en presencia de campos magnéticos debido a que, presentan electrones desapareados en su configuración electrónica.
- a) Diamagnéticas      b) Ferromagnéticas      c) Paramagnéticas      d) Magnetizables
27. Evento atribuido al contacto físico entre el núcleo interno terrestre de composición metálica con el flujo constante y dinámico del material fundido que constituye al núcleo externo terrestre.
- a) Paleomagnetismo terrestre      b) Eje de rotación terrestre  
c) Campo magnético      d) Norte y sur geográficos
28. Proceso por el cual la influencia del magnetismo terrestre queda grabada en las rocas de origen ígneo.
- a) Magnetización      b) Metamorfismo      c) Magnetometría      d) Diagénesis
29. Propiedad magnética donde los electrones de las sustancias son fuertemente influenciados por la presencia de campos magnéticos externos.
- a) Diamagnetismo      b) Paramagnetismo  
c) Ferrimagnetismo      d) Ferromagnetismo
30. Ángulo formado entre el norte magnético local y el norte geográfico.
- a) Declinación magnética      b) Ángulo terrestre  
c) Paralaje      d) Rotación terrestre





# Capítulo 3

## Periodicidad

Gerardo Barón Sánchez, Israel Alfaro Fuentes, Ricardo Alfaro Fuentes

### 3.1 Introducción

La química tiene muchas aplicaciones en diferentes campos de la ciencia; esto ha sido posible gracias a la evolución que experimentó prácticamente a partir del siglo XVIII, cuando esta disciplina adquirió definitivamente las características de una ciencia experimental. Muchos científicos que contribuyeron a su desarrollo se dieron cuenta que los diferentes elementos químicos que existen en la naturaleza tienen propiedades y características únicas, pero que están relacionados entre ellos debido a su *Periodicidad Química*, con la cual se puede determinar el comportamiento y las propiedades de los elementos, moléculas, y a partir de esto, de los materiales. Si se logra comprender el comportamiento y las propiedades de los elementos y de los compuestos, se estará en la posibilidad de tomar mejores decisiones en cuanto al mejoramiento de los procesos industriales y del peligro que representa la emisión a la atmósfera de ciertos productos nocivos para el ser humano.

En vista de que la ingeniería se enfoca al manejo eficiente y productivo de los recursos naturales, el entendimiento de la química es fundamental para todo aquel profesionalista que haya elegido una de las disciplinas de la ingeniería como su área de interés.

#### 3.1.1 Historia

Desde la prehistoria, la química ha estado ligada al hombre con el conocimiento de la naturaleza y su desarrollo cultural. Las civilizaciones antiguas ya usaban ciertas tecnologías que les permitían transformar su entorno en aras de su beneficio y comodidad. Es esta curiosidad por entender la naturaleza que dio lugar a que los alquimistas llevaran a cabo experimentos y trataran de interpretar los resultados obtenidos, con el objeto de lograr una explicación racional de ciertos fenómenos. De esta manera establecieron los cimientos de lo que actualmente es la química moderna.

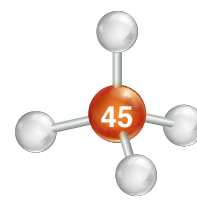
Actualmente, la ciencia tiene muchos retos que superar, como, por ejemplo, el desarrollo de nuevos materiales, ya que el avance de la tecnología corre paralelamente a dicho desarrollo.

#### 3.1.2 Filosofía y ciencia

La Grecia antigua es considerada la cuna de la filosofía, el pensamiento y el inicio de la ciencia dogmática. Muchos filósofos, a partir de sus observaciones, definieron términos clave para la ciencia, como materia y sustancia. El filósofo Aristóteles, postuló que las sustancias elementales

#### Sumario

- 3.1. Introducción
- 3.2. La tabla periódica en la actualidad
- 3.3. Características generales de los elementos
- 3.4. Características químicas periódicas
- 3.5. Tendencias periódicas
- 3.6. Aplicaciones en ciencias de la tierra
- 3.7 Autoevaluación





eran *tierra, aire, agua y fuego*. En paralelo, el filósofo Demócrito de Abdera, proclamó que la materia estaba constituida por partículas indivisibles que eran su unidad mínima; sin embargo, esta teoría no fue popular en la cultura occidental dado el peso de la obra aristotélica. La teoría de Demócrito tuvo algunos seguidores entre los que figuraba Tito Lucrecio Caro quien continuó inspirado con la idea de la partícula indivisible.

Entre los siglos III A.C. - XVI D.C no existía la química como ciencia, empero, fueron realizadas múltiples observaciones acerca de la transformación de la materia, lo que originó, entre otras cosas, la pretensión de transformar el plomo en oro o la búsqueda de la piedra filosofal. Estas creencias dogmáticas dieron origen a la alquimia, la cual sentó las bases de la experimentación moderna.

Los alquimistas desarrollaron el modelo de la existencia de una sustancia elemental conocida como *flogisto*, que explicaba el proceso de combustión de las sustancias. Este pensamiento fue aceptado durante un largo periodo de tiempo y no fue sino hasta el siglo XVIII cuando el químico francés Antonie Laurent Lavoisier, “El padre de la química”, quien, a partir de sus estudios sobre la combustión, postuló una ley muy importante que determinó el nacimiento de la química como ciencia, tal cual la concebimos en la actualidad. Dicha ley establece que “*La materia puede cambiar y formar sustancias nuevas, pero no surgir de la nada o desaparecer en ella*”; este enunciado es conocido como *Ley de la conservación de la materia*. Lavoisier notó en este tipo de experimentos, que no existía un cambio en la masa de las sustancias, a pesar de que hubiera un cambio químico. Experimentalmente, demostró que la sustancia elemental conocida como flogisto no existía y que la combustión sucedía por la reacción del oxígeno con las sustancias. Inicialmente la sociedad no aceptó muy bien los trabajos de Lavoisier, ya que no comprendían su gran valor científico. Asimismo, tuvieron que pasar algunos años para que el mundo se diera cuenta de estas investigaciones y de su veracidad. Fueron épocas en las que se tuvo un lento desarrollo.

Paulatinamente el conocimiento de la naturaleza y sus fenómenos fue ampliándose y profundizándose de modo tal que su expansión requirió un sistema para sintetizar y dar coherencia a toda la información. Así es como fue creada la Tabla Periódica.

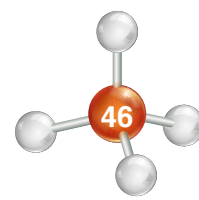
### 3.1.3 Evolución de la tabla periódica

El siglo XIX se caracterizó por el descubrimiento y aislamiento de varios elementos químicos. Los procesos para su identificación y aislamiento fueron desarrollados empleando diferentes técnicas, como la descomposición química (combustión), el uso de técnicas con electricidad (electroquímica) o el estudio de las características ácido-base de las sustancias. Una técnica que tuvo auge considerable fue la electroquímica, cuyo ejemplo más sencillo, consiste en la descomposición de sustancias por electrólisis; tal es el caso de la obtención de hidrógeno (H<sub>2</sub>) y oxígeno (O<sub>2</sub>) a partir del agua. Este proceso consiste en hacer pasar una corriente eléctrica a través del agua para descomponerla en sus elementos en fase gaseosa (Figura 3.1).



Figura 3.1. Obtención de H<sub>2</sub> y O<sub>2</sub> gaseoso por electrólisis del agua.

Hacia 1860, ya habían sido identificados, aislados y caracterizados aproximadamente setenta de los ciento trece elementos químicos que conocemos en la actualidad. Es importante destacar que algunos de ellos ya eran conocidos y utilizados desde la antigüedad, como el arsénico, el cobre y la plata.







A medida que los elementos fueron descubiertos y sus propiedades estudiadas, resultó necesario organizar todos esos datos de una manera útil, con el fin de que el estudio de las propiedades de estos elementos fuera más simple y práctico.

Este proceso no fue sencillo y como prueba de ello se plantearon varios modelos previos a la tabla actual. A continuación, serán citados algunos de estos modelos.

### 3.1.4 Las tríadas de Döbereiner

El químico alemán **Johann Wolfgang Döbereiner (1780–1849)**, propuso en 1817 el ordenamiento de los elementos en grupos de tres, ya que observó que cada tres elementos que se conocían en ese momento, presentaban propiedades similares entre ellos. A este ordenamiento lo denominó *tríadas* (Figura 3.2). Una de las aportaciones de este ordenamiento fue que la masa atómica del elemento central, por cada tríada, es aproximadamente la semisuma de las masas atómicas de los elementos extremos. Por ejemplo, la semisuma de las masas atómicas del litio y potasio, estaba cerca de la masa atómica del sodio. Además, las densidades para estas tríadas siguieron un patrón similar.

No obstante, en este modelo de clasificación, no todos los elementos presentaban la misma tendencia, ya que conforme se descubrían otros, se observaba que poseían algunas propiedades similares y algunas diferencias marcadas entre ellos.

Un ejemplo fue el descubrimiento del rubidio y cesio los cuales tienen masas atómicas muy diferentes, pero poseen propiedades alcalinas similares a las de la tríada de litio, sodio y potasio. Ante tal incongruencia, la teoría de las tríadas fue perdiendo valor, pero fue una contribución importante que anticipó al concepto de *familias químicas* que se desarrollaría más tarde.

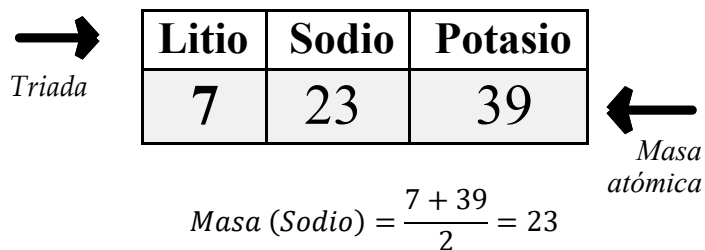


Figura 3.2. Caracterización de los elementos en tríadas.

### 3.1.5 La hélice telúrica de Chancourtois

Otro modelo desarrollado para ordenar a los elementos fue aportado por **Alexandre-Emile Beguyer de Chancourtois (1820–1886)**, quien utilizó un cilindro vertical con 16 líneas equidistantes en su superficie, paralelas al eje del cilindro. Una vez trazadas las líneas dibujó una hélice a 45° de la base del cilindro y posteriormente acomodó en ella a los elementos en orden creciente de acuerdo con su masa atómica (Figura 3.3). Presentó a los elementos de tal forma que diferían en múltiplos de dieciséis y coincidían en un orden a través de la misma línea vertical. Esta forma de ordenar a los elementos denotó las propiedades similares que poseían entre ellos.

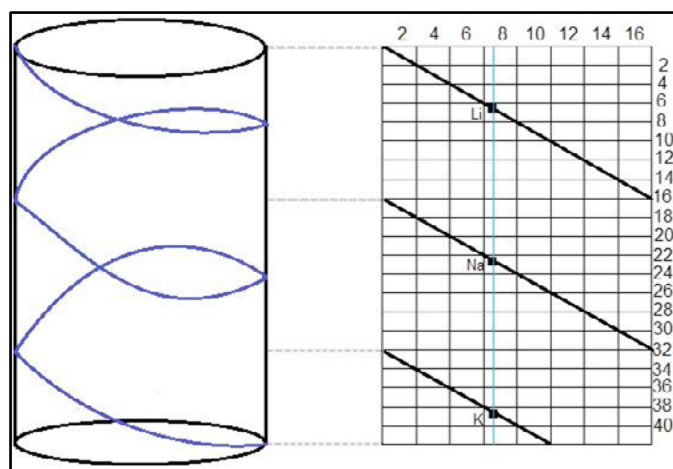


Figura 3.3. Hélice Telúrica de Chancourtois.



Fue el primer científico en acomodar los elementos de forma gráfica tomando como punto de referencia la masa atómica de cada uno de los elementos, descubrió una tendencia regular que posteriormente se conocería como *periodicidad*, ya que los elementos que se encontraban alineados en línea recta dentro de la hélice poseían características similares; sin embargo, no se le dio gran importancia debido a la complejidad del diagrama.

Siendo un modelo confuso y poco práctico, no tuvo auge, pero fue un referente para que Newlands desarrollara la *Ley de las octavas*.

### 3.1.6 La ley de octavas de Newlands

La aportación de **John Alexander Reina Newlands (1837– 1898)** consiste en el ordenamiento de los elementos en orden creciente de masa atómica, tuvo como base su conocimiento musical: observó que, contando a partir de alguno de ellos, el octavo elemento poseía propiedades similares al inicial. Newlands llamó a esta clasificación la *Ley de las Octavas*, haciendo analogía con la escala musical (compuesta por ocho notas) y que, partiendo de una nota cualquiera, a la octava nota se regresa a la misma nota, pero más aguda o más grave (Figura 3.4).

Algunas líneas del pentagrama se encontraban vacías, debido a que en la época de Newlands aún no eran descubiertos muchos elementos, entre los que están los gases nobles, los cuales estarían marcados al final de la escala musical.

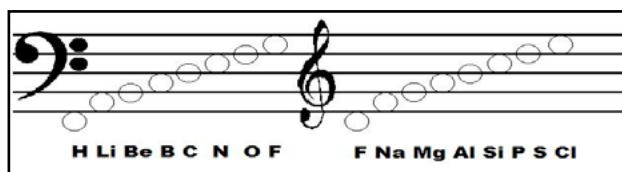


Figura 3.4. Representación de la Ley de las Octavas.

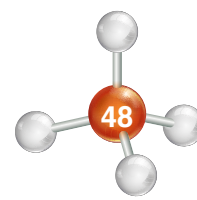
Este modelo atómico tenía deficiencias científicas, por lo que al paso del tiempo se fue desechando. Algunos de los motivos de la no aceptación en el ámbito científico fueron:

- No existía lugar para los elementos que se descubrieron posteriormente.
- Para el acomodo de los elementos no consideró relevante la masa atómica del elemento.
- Algunos elementos no encajaban en el esquema, como el caso del cromo, que se encontraba mal posicionado bajo el aluminio y el magnesio, que es un elemento metálico, posicionado debajo del fósforo, que es un no metal.
- En algunos casos, dos o más elementos compartían la misma fila y columna.
- A partir del calcio se dejaba de cumplir la regla de las octavas.

### 3.1.7 Meyer y Mendeleiev, la primera Tabla Periódica

Durante el siglo XIX, muchos científicos famosos hicieron contribuciones importantes en el diseño de lo que sería la *tabla periódica*; sin embargo, las teorías tenían muchas lagunas científicas por lo que no trascendieron y fue hasta que dos investigadores, de forma independiente, acomodaron los elementos tomando como base las masas atómicas: **Julius Lothar Meyer (1830–1895)** y **Dimitri Ivanovich Mendeleiev (1834-1907)**.

Los trabajos de ambos científicos tenían muchas similitudes entre sus resultados. En 1864, tanto Meyer como Mendeleiev, publicaron sus versiones de la tabla periódica para clasificar los elementos. Estas tablas contenían aproximadamente la mitad de los elementos conocidos actualmente, organizados tomando como parámetro la masa atómica y mostrando un incremento





en su periodicidad. Esta primera versión, en ambos casos, tenía muchos espacios vacíos debido a que todavía no eran descubiertos todos los elementos.

En el año de 1868, Meyer construyó una tabla extendida que trataba de compensar la falta de elementos de su versión inicial; sin embargo, en 1867, un año antes de que publicara su nueva tabla, Mendeleiev, publicó una más completa y con mejores características.

Por esta aportación Dimitri Ivanovich Mendeleiev es considerado históricamente como el padre de la tabla periódica. Importa mencionar que su avance se debió considerablemente al trabajo de otro científico contemporáneo, el químico italiano Stanislao Cannizzaro, a quien conoció en el célebre Congreso de Química de Karlsruhe (Alemania) y cuyos planteamientos sobre la masa atómica marcaron su futuro como científico. Mendeléiev regresó a San Petersburgo y fue profesor de química en el Instituto Técnico en 1863 y profesor de química general en la Universidad de San Petersburgo en 1866. Escribió los dos volúmenes de *Principios de Química* (1868-1870), uno de los primeros libros de texto sobre química, que se convirtió en un clásico.

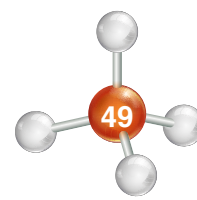
Durante la elaboración de su obra, Mendeléiev clasificó los sesenta y tres elementos hasta entonces conocidos, según sus propiedades químicas y los ordenó en familias que presentaban propiedades similares. La primera parte del texto estaba consagrada a la química de los halógenos. En 1869, publicó la primera versión de la tabla periódica y en 1871 una versión corregida en la que dejaba huecos para elementos todavía desconocidos.

Continuó con la química de los elementos metálicos ordenándolos según su poder de combinación, ordenando primero a los metales alcalinos, en segundo los alcalinotérreos y así sucesivamente, etc. En este momento de la ciencia, era difícil clasificar metales como el cobre y el mercurio los cuales presentaban, en ocasiones, valor uno y otras veces valor dos. Mientras intentaba una salida a este dilema, Mendeléiev encontró relaciones entre las propiedades y las masas atómicas de los halógenos, los metales alcalinos y los metales alcalinotérreos, concretamente en las series Cl-K-Ca, Br-Rb-Sr y I-Cs-Ba. En un esfuerzo por generalizar este comportamiento, creó una ficha para cada uno de los sesenta y tres elementos conocidos en la que presentaba el símbolo del elemento, su masa atómica y sus propiedades físicas y químicas características. Cuando colocó las tarjetas en una mesa, en orden creciente de masas atómicas como en un juego de naipes, quedó formada la tabla periódica. En 1869, desarrolló la *ley periódica* y publicó su trabajo: *Relación de las propiedades de los elementos y sus masas atómicas*. La ventaja de la tabla de Mendeleiev sobre los intentos anteriores de clasificación, era que no sólo presentaba similitudes en pequeños grupos como las tríadas, sino que mostraba similitudes en un amplio entramado de relaciones verticales, horizontales, y diagonales.

En el momento que Mendeléiev desarrolló su tabla periódica, las masas atómicas experimentalmente determinadas no siempre eran exactas, por lo que hubo que reordenar los elementos. Por ejemplo, cambió la masa del berilio de catorce a nueve. Esto lo colocó en el Grupo 2 encima del magnesio, cuyas propiedades coincidían más que donde se había colocado anteriormente (encima del nitrógeno).

En total Mendeléiev hubo de mover diecisiete elementos a nuevas posiciones para poner sus propiedades en correlación con las de los demás. Estos cambios evidenciaron que había errores en las masas atómicas aceptadas de algunos elementos y fueron rehechos los cálculos para muchos de ellos.

No obstante, aún después de que las correcciones fueron hechas, algunos elementos todavía necesitaron ser colocados en un orden diferente del que se deducía de sus masas atómicas. A





partir de los huecos presentes en su tabla, Mendeleiev predijo la existencia y las propiedades de elementos desconocidos, que él llamó eka-aluminio, eka-boro, y eka-silicio.

Más tarde fueron descubiertos el galio, el escandio y el germanio, coincidiendo con sus predicciones.

### 3.2 La tabla periódica en la actualidad

Concluido el trabajo de Mendeleiev, fueron realizadas algunas adecuaciones mínimas a la estructura de la tabla periódica. Las modificaciones más representativas se refieren a elementos descubiertos e incorporados en la tabla actual (Figura 3.5), la cual se rige por la ley periódica que dice: *“Los elementos están acomodados en orden de sus masas atómicas crecientes y los que tienen propiedades químicas similares se encuentran en intervalos definidos”*.

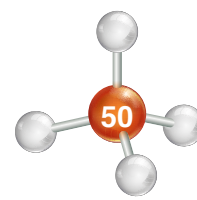
Tabla Periódica de los elementos

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

Figura 3.5. Tabla periódica actual.

En el apéndice A se presenta una tabla periódica que contiene diversas propiedades que se revisaran más adelante en este capítulo de cada elemento químico.

Así surgió el concepto de periodicidad, el cual podrá ser manejado de manera cabal si el estudioso comprende adecuadamente las formas en las que están clasificados los elementos, los cuales aparecen ordenados en clases, periodos, grupos o familias y bloques.







### 3.2.1 Clases

Esta es la clasificación más general los elementos y se refiere, básicamente, a las aplicaciones o características con respecto a la vida diaria. Encontramos cuatro clases en la tabla periódica:

- Elementos representativos: son los elementos más abundantes del universo.
- Elementos de transición: metales de los periodos 4 a 7, con excepción de los lantánidos y actínidos.
- Elementos de transición interna: series de lantánidos y actínidos.
- Gases nobles: gases no reactivos.

### 3.2.2 Períodos

Este término se refiere a los renglones o filas horizontales de la tabla periódica. En la actualidad la tabla periódica tiene siete períodos.

### 3.2.3 Familias

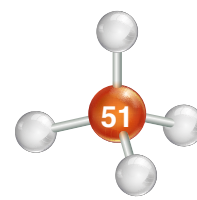
El término *Familias* fue cambiado por la IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry), por el término *grupos* (Figura 3.6), empero en la actualidad se conocen y manejan ambos vocablos. Las familias corresponden al agrupamiento de los elementos de forma vertical, tomando como base los elementos representativos (Tabla 3.1).

Figura 3.6. Tabla Periódica con la clasificación anterior y la propuesta por la IUPAC.

GRUPO	FAMILIA
I A	Metales alcalinos
II A	Metales alcalinotérreos
III A	Familia del boro
IV A	Familia del carbono
V A	Familia del nitrógeno
VI A	Familia del oxígeno o calcógenos
VII A	Halógenos
VIII A	Gases nobles
I B a VII B	Elementos de transición

Tabla 3.1. Clasificación anterior

La versión actual de la tabla periódica denota la secuencia de las familias o grupos enumerando las columnas de la 1 a la 18 de izquierda a derecha con números arábigos, mientras que anteriormente se clasificaban con números romanos con las letras A y B para diferenciar los metales de los no metales. Este ordenamiento, sin embargo, no es del todo correcto, ya que las dos primeras columnas pertenecen al grupo de elementos metálicos.





La tabla periódica representa un gran logro del intelecto humano ya que posee información que permite conocer propiedades como la electronegatividad, la energía de ionización, la afinidad electrónica, el radio atómico, el radio iónico, etc., que son fundamentales para predecir el comportamiento de las sustancias que nos rodean.

### 3.2.4 Bloques

Esta clasificación es poco empleada. Se fundamenta en consideraciones cuánticas acerca de la ubicación de los electrones en los niveles energéticos. En esta clasificación los elementos se agrupan dependiendo del último subnivel que conforma al elemento (Figura 3.7).

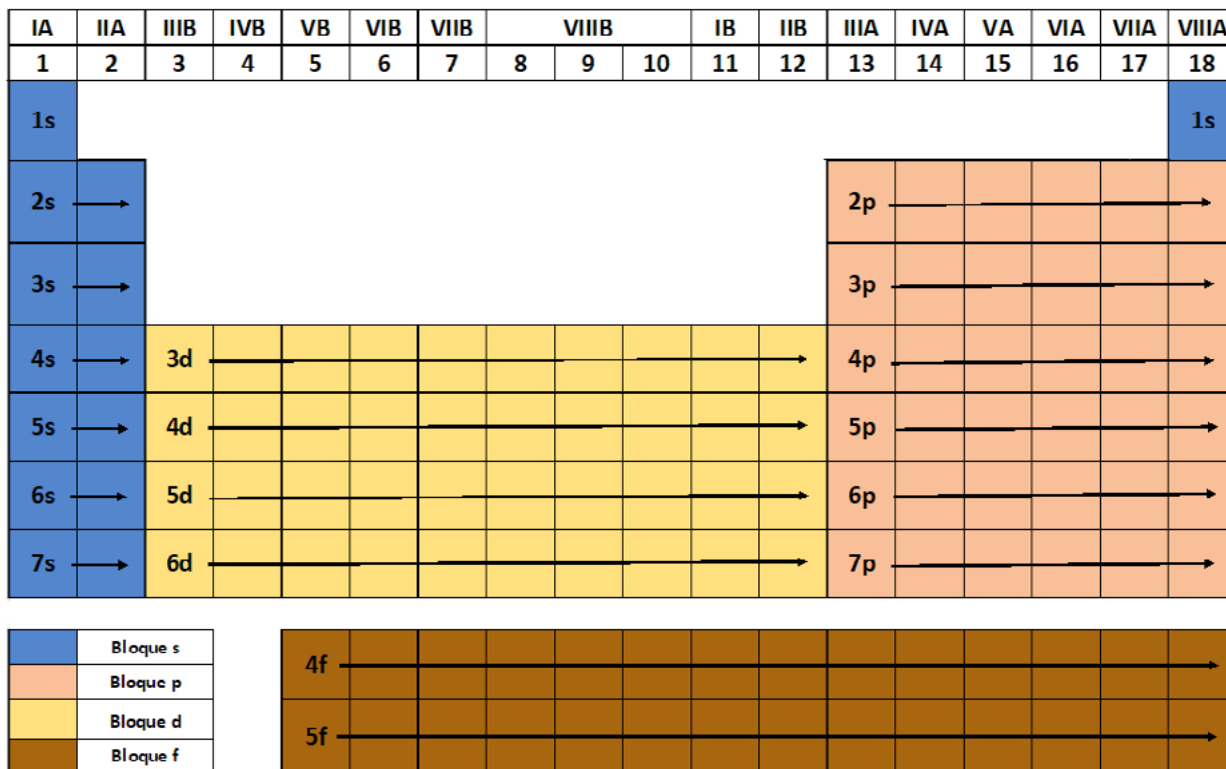


Figura 3.7. Esquema de los bloques en la tabla periódica.

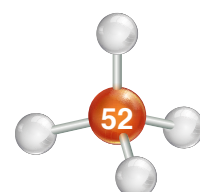
La Tabla 3.2 muestra la clasificación de los bloques respecto a los grupos.

Bloque "s"	Grupos IA y IIA
Bloque "p"	Grupos del IIIA al VIIIA
Bloque "d"	Elementos de transición
Bloque "f"	Elementos de transición interna

Tabla 3.2. Clasificación de los bloques.

Esta clasificación, igualmente, permite explicar por qué están separados los grupos del bloque f de la tabla periódica.

En síntesis, la ubicación en la tabla periódica de los elementos está dada por sus características: número de protones, número de electrones de valencia y último nivel en el que se encuentran los electrones de valencia. Aunque cada elemento tiene características diferentes, algunos elementos presentan ciertas similitudes en sus propiedades y por ello se encuentran agrupados en familias y reciben un nombre característico.





### 3.3 Características generales de los elementos

Uno de los primeros aspectos que el lector observa en la tabla periódica es una clasificación muy general de los elementos de acuerdo con sus características metálicas, no metálicas, metaloides y gases nobles. En la Figura 3.8 se puede observar con facilidad esta clasificación que para cada uno de los tipos de elementos combina tanto periodos como familias.

Principales características de los metales, no metales, metaloides y gases nobles.

#### 3.3.1 Metales

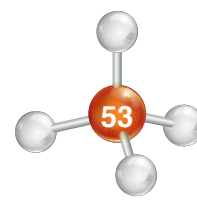
- Todos los elementos son sólidos, con excepción del mercurio.
- Tienen puntos de fusión altos, con excepción de cesio, galio y rubidio, que tienen puntos de fusión menores a 50°C.
- Poseen brillo metálico, el cual se logra por el pulido. Reflejan la mayor parte de la luz que reciben.
- Son excelentes conductores de la electricidad.
- Muestran carga eléctrica positiva en los procesos de electrólisis.
- Requieren de poca energía para perder electrones y adoptar una estructura estable en forma de cationes.
- Son buenos conductores del calor.
- Son materiales dúctiles y maleables.

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

Figura 3.8. Agrupaciones de los elementos en la Tabla Periódica.

#### 3.3.2 No metales

- No poseen lustre.
- No conducen bien ni el calor ni la electricidad.
- Presentan los tres estados de agregación de la materia: gases (N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, F<sub>2</sub> y Cl<sub>2</sub>), líquidos (Br<sub>2</sub>) y los demás elementos en fase sólida.
- Son elementos frágiles y no son dúctiles, ni maleables.
- Los puntos de fusión y de ebullición regularmente son bajos en comparación con los metales.





### 3.3.3 Metaloides

- Tienen comportamiento tanto de metales como de no metales, dependiendo de con qué elemento se combinen.
- Pueden ser brillosos u opacos.
- Poseen una gran maleabilidad; esto es, cambian de forma con gran facilidad.
- Tienen una mayor capacidad de conducir tanto la electricidad como el calor en comparación con los no metales.
- Son más semiconductores que conductores.

### 3.3.4 Gases nobles

Constituyen un conjunto de elementos incluidos en el grupo 18 de la tabla periódica. Su principal característica es que presentan su última capa electrónica completa. Tienen una estructura atómica extremadamente estable, especialmente en los miembros más ligeros, por lo que prácticamente no reaccionan. Principales características de los gases nobles.

- Todos tienen configuraciones electrónicas completas  $ns^2np^6$ , con excepción del helio, cuya configuración electrónica es  $1s^2$ .
- Son sustancias monoatómicas y sólo presentan interacciones debido a las fuerzas de Van der Waals.
- El estado de agregación en la naturaleza es gaseoso.
- Poseen puntos de ebullición muy bajos, siendo el más bajo el del helio (el punto más bajo de todos los elementos, 4 K), y conforme sube el número atómico también se incrementa el punto de ebullición.
- Los puntos de fusión son también muy bajos.
- Las fuerzas ejercidas dentro de los átomos de los gases nobles son extraordinariamente débiles.
- A pesar de que los gases nobles presentan una reactividad muy pobre, son capaces de intervenir en ciertas combinaciones. En la actualidad se sabe que el kriptón y el radón (los de mayor masa) reaccionan frente a elementos como con el flúor, oxígeno y en algunos casos con cloro.

## 3.4 Características químicas periódicas

Estas características fueron establecidas con la contribución de íclitos científicos como Dalton, Rutherford y Bohr. Ellos hicieron posible el conocimiento de las propiedades a nivel atómico de los elementos químicos.

### 3.4.1 Número atómico

El número atómico ( $Z$ ) es una propiedad con la cual se determina el orden progresivo de los elementos. A partir de esta característica fueron organizados de manera definitiva los elementos químicos en la tabla periódica.

El número atómico es definido como la cantidad de protones presentes dentro del núcleo del átomo. Este número, a su vez, permite definir la configuración electrónica del elemento, que consiste en el arreglo de los electrones en los diferentes orbitales atómicos.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

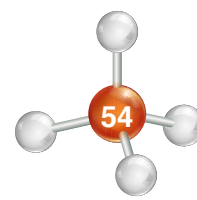
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22







### 3.4.2 Masa atómica

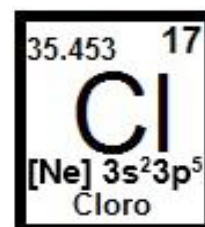
Cap. 1

La masa atómica de un átomo es la suma de las masas de todos los protones, neutrones y electrones que componen al átomo.

Cap. 2

El valor asignado a la masa atómica de un elemento es la media ponderada de las masas atómicas de todos sus isótopos, teniendo en cuenta la abundancia relativa de cada uno de ellos. Se denomina *isótopo* a todos los átomos de un elemento que tienen el mismo número atómico pero diferente número de masa; esto es, que poseen el mismo número de protones, pero diferente número de neutrones. Un ejemplo es el caso del cloro el cual posee dos isótopos estables: el  $^{35}\text{Cl}$  y el  $^{37}\text{Cl}$ , cuya abundancia en la naturaleza es de 76% y 24% respectivamente. Sin embargo, en las tablas periódicas, por lo regular, sólo se coloca el promedio de los isótopos como masa atómica, tal y como se observa en la Figura 3.9.

Cap. 3



Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Figura 3.9. Representación del cloro dentro de la tabla periódica.

Cap. 8

La expresión de la masa de los elementos, emplea la unidad de *masa atómica (uma)*. La uma equivale a la doceava parte de la masa del núcleo del carbono-12, debido a que este es el isótopo más abundante del elemento. Este isótopo es tomado como referencia debido a que posee seis protones y seis neutrones en su núcleo, por lo que la masa atómica del carbono-12 es 12 uma. El valor de la uma es muy cercano a la masa de un protón.

Cap. 9

Es entonces que masa atómica relativa, unidad de masa atómica y peso atómico, son prácticamente sinónimos.

Cap. 10

Cap. 11

La reactividad de los elementos produce de modo continuo uniones químicas, generando *compuestos*. Cada compuesto posee características propias y sus aplicaciones prácticas han sido muy versátiles. Para hablar de las aplicaciones hay que conocer sus propiedades intrínsecas.

Cap. 12

Cap. 13

### 3.4.3 Puntos de fusión y ebullición

Cap. 14

Tanto el punto de fusión como el de ebullición corresponden a dos características físicas, las cuales, además de ser específicas para cada elemento y/o compuesto, están referidas a transformaciones en el estado de agregación como es el cambio de sólido a líquido, punto de fusión, o el cambio de fase de líquido a gas en el punto de ebullición. En el caso de la conversión de gas a líquido se denomina *condensación* y de líquido a sólido se llama *solidificación*. Los datos para cada uno de los puntos de fusión y ebullición deben ser reportados a *presión estándar* (1 atmósfera). Entre todos los valores descritos en la tabla periódica, los puntos de fusión y ebullición no presentan una tendencia ya que cada elemento presenta un valor característico: no se puede generalizar más allá de indicar que los metales tienen altos puntos de fusión y ebullición, los no metales presentan puntos de fusión y ebullición bajos y todos los gases nobles presentan muy bajos puntos de fusión y ebullición.

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

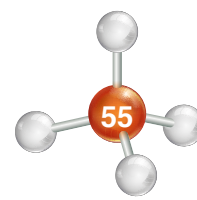
### 3.4.4 Carácter ácido-base

Cap. 20

Conforme a la definición *ácido-base de Arrhenius* un *ácido* consiste en una especie química capaz de donar un protón,  $\text{H}^+$ , mientras que una *base* es aquella que puede donar un ion hidróxido,  $\text{OH}^-$ . Un ejemplo típico es la disociación del agua, la cual da lugar a iones hidrógeno y a iones hidróxido, que constituyen el ácido y la base, respectivamente.

Cap. 21

Cap. 22





Este concepto está referido a especies disueltas en agua; y es por ello que la información que el lector obtiene de la tabla periódica con respecto a si un elemento es ácido o básico se refiere al comportamiento de dicho elemento en presencia del referido líquido: los metales de las familias 1 o 2 en medio acuoso reaccionan rápidamente formando hidróxidos, de ahí su carácter básico, mientras que otros metales pueden interactuar con el agua sin presentar reacción aparente, por lo que se pueden considerar como neutros. En el caso de los no metales también pueden reaccionar de moderado a rápido con el agua presentando un carácter ácido. Con esta característica tampoco se puede mostrar tendencia alguna con respecto a un periodo o una familia.

### 3.4.5 Radio atómico, iónico y covalente

El término *radio atómico* se refiere a la distancia más probable entre el centro del núcleo de un átomo y el electrón más externo que conforma al elemento (Figura 3.10). Con esta definición destacamos el término “más probable”, ya que, según la mecánica cuántica, los electrones en el átomo no se encuentran confinados en una órbita o trayectoria cerrada y sólo podemos hablar de la probabilidad de encontrar un electrón en una zona en el espacio. Para indicar la magnitud del *radio atómico* se emplea a la unidad básica de longitud (metro, m) del Sistema Internacional. En virtud de que la magnitud del radio de los átomos es muy pequeña, ésta se expresa con el prefijo numeral de nano ( $n=10^{-9}$  m) o pico ( $p=10^{-12}$  m), por lo que las medidas de los radios se expresan en nanómetros o picómetros. Otra magnitud con la que se pueden expresar los radios es el Angstrom ( $1\text{Å} = 1 \times 10^{-10}$  m), aunque no es tan común su utilización como en el caso de los dos primeros.

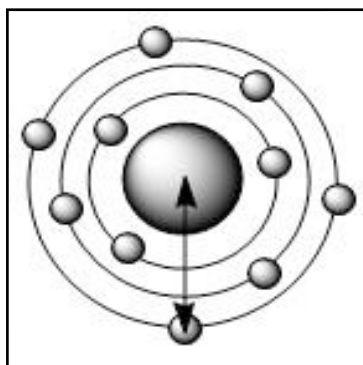


Figura 3.10. Representación gráfica del radio atómico.

Para manejar el concepto de *radio iónico* debemos entender primero qué es un *ion*. Un ion es un átomo con carga, ya sea positiva, debido a la pérdida de electrones, o negativa, si gana uno o más electrones. Las entidades deficientes de electrones presentan una carga neta positiva y se llaman *cationes*. Las entidades afines a los electrones cuya carga neta es negativa se llaman *aniones*. La existencia de estas especies cargadas se debe a la ganancia o pérdida de electrones. Por naturaleza, los átomos siguen el principio de electroneutralidad en donde la carga neta es cero o neutra; en el momento en que el átomo llega a perder un electrón, obtiene una carga  $1+$ , mientras que, si gana un electrón, el átomo tendrá una carga  $1-$ . El *radio iónico de una especie que ha perdido un electrón presenta una distancia menor que el radio atómico original*, debido a que, al tener una carga positiva, los demás electrones se sienten mucho más atraídos hacia el núcleo, reduciendo el radio. Al contrario, cuando *el átomo gana un electrón, el radio iónico es mayor que su radio atómico de origen*, situación debida a que el electrón extra no se siente tan atraído hacia el núcleo del átomo y por repulsión misma de los electrones, hace aumentar el radio (Figura 3.11). El radio iónico aumenta a medida que se baja en un grupo, pero a diferencia del radio atómico, no presenta una clara tendencia de crecimiento en un periodo, ya que depende del elemento con el que se generó el ion y si el elemento es factible de presentar diferentes pérdidas o ganancias de electrones. Por último, algunos elementos poseen más de un ion. Esta información se refiere a si el átomo presenta diferentes estados de oxidación.

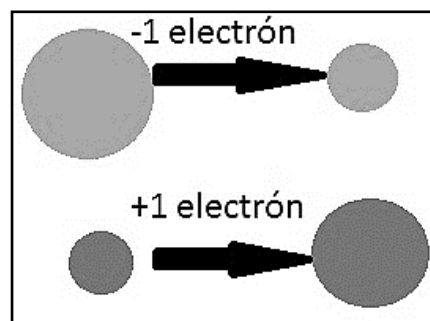
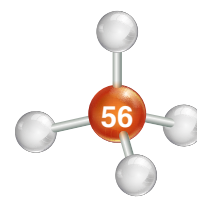


Figura 3.11. Variación del radio en función de la ganancia o pérdida de electrones.





### 3.4.6 Radio covalente

Una de las cualidades más importantes que describe al *enlace covalente* es la compartición de los electrones para formarlo; estos electrones son los que se encuentran en la capa más externa del átomo, es decir, de los *electrones de valencia*. Debemos entender como *radio covalente* a un medio de la distancia entre los átomos que forman el enlace covalente. En cuanto a este radio es muy difícil determinar una tendencia general debido a que este enlace está determinado por dos átomos y si bien es cierto que existen muchas moléculas con las que determinar el radio, cada uno de los enlaces tiene un radio diferente. De ahí su dificultad de indicar alguna tendencia.

### 3.4.7 Estructura Cristalina

La estructura cristalina está caracterizada microscópicamente por la agrupación de iones, átomos o moléculas conforme a un modelo de repetición periódica, la cual se define como *celda unitaria*. Esta celda es la encargada de mostrar cómo se observan macroscópicamente los cristales. Las características descritas en la tabla periódica con respecto a la estructura cristalina se refieren solamente a cómo es que están congregados entre sí los átomos de un mismo elemento o moléculas y dado que cada compuesto presenta diferentes relaciones de radio y propiedades, tampoco es posible definir una tendencia clara dentro de la tabla periódica.

### 3.4.8 Conductividad térmica

La conductividad térmica es la capacidad de un material para transportar energía en forma de calor, distribuida sobre todo el objeto. Este transporte de energía se denomina *flujo térmico*, ocurre como lo establece la Segunda ley de la Termodinámica: "el calor siempre fluirá del punto que se encuentre más caliente hacia otro punto más frío", (Figura 3.12).

En el proceso de calentamiento de un objeto, los átomos del material absorben esta energía, provocando que haya una mayor agitación térmica, lo cual propicia que los átomos adyacentes también vibren, hasta que el objeto alcanza el equilibrio térmico.

Los metales presentan altas conductividades térmicas, en comparación con los no metales (por lo general, son malos conductores térmicos), mientras que los metaloides, que presentan mayor carácter metálico, son lo que conducen mejor que los otros metaloides que tienen mayor carácter no metálico. Los metaloides, en general, presentan mejores conductividades que los no metales.

### 3.4.9 Conductividad eléctrica

La *conductividad eléctrica* es la capacidad de un material para permitir el paso de la corriente eléctrica, que es el transporte de electrones. La conductividad eléctrica depende de la estructura atómica y molecular del material. Es obvio que los metales, debido a las características propias de sus enlaces, son mejores conductores que los no metales (que, por lo general, son malos conductores). Tanto que, regularmente, se les cataloga como materiales aislantes. Los metaloides que presentan una conductividad baja son usados en la industria como materiales semiconductores.

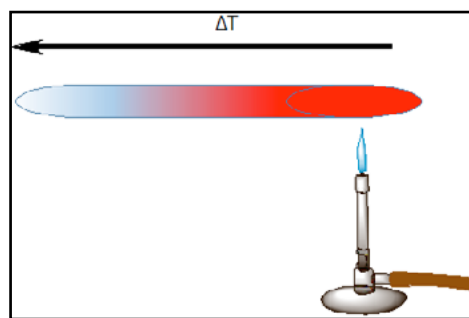


Figura 3.12. Conductividad térmica. La figura representa el flujo de calor sobre un material, el color rojo la zona más caliente, mientras el color azul representa la parte más fría.



## 3.5 Tendencias periódicas

Ciertas propiedades de los elementos exhiben un cambio gradual en la medida que se desplazan a través de una familia o de un período. Las siguientes son las principales tendencias que presentan los elementos.

### 3.5.1 Electronegatividad

La electronegatividad de un elemento dentro de la tabla periódica es definida como la capacidad que tienen los átomos de un elemento para atraer hacia sí, los electrones de enlace con otro átomo; por tanto, no es propiedad de un átomo aislado, sino del átomo en la formación de un compuesto. Un elemento es muy electronegativo si posee una gran tendencia a atraer electrones y, por el contrario, si pierde electrones con facilidad (como los elementos alcalinos) se afirma que el elemento es muy electropositivo o muy poco electronegativo.

Conocer qué tan electronegativo es un elemento resulta muy útil debido a que permite conocer la cantidad de energía necesaria para que se forme un enlace, así como predecir la polaridad de los enlaces y las moléculas.

En 1932, **Linus Pauling (1901-1994)**, asignó valores numéricos a la electronegatividad, estableciendo el valor de 4.0 para el flúor, el átomo más electronegativo de la tabla periódica. La Figura 3.13 muestra los valores de la electronegatividad de Pauling con respecto al número atómico, se observa un comportamiento periódico, siendo los elementos más electronegativos los halógenos, y los menos electronegativos (o más electropositivos) los elementos de la familia uno de la tabla periódica.

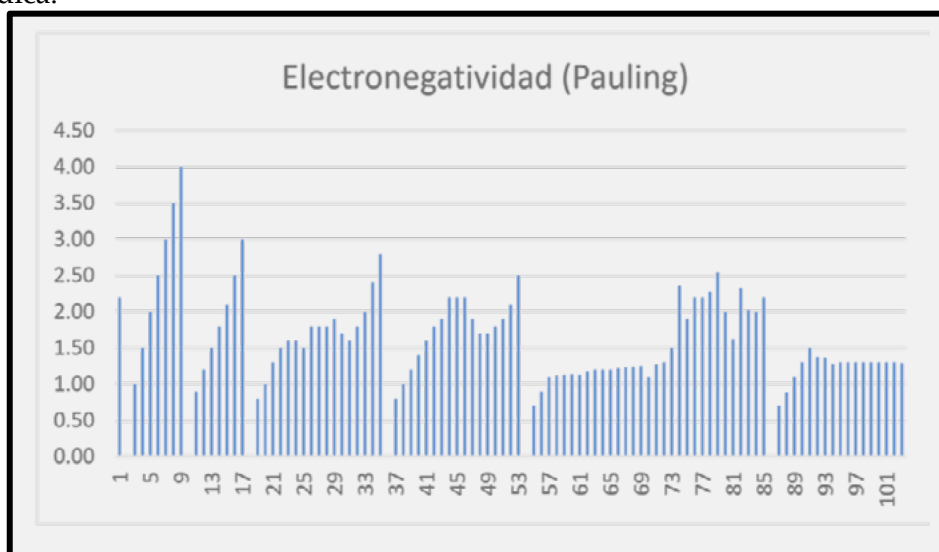
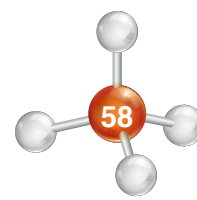


Figura 3.13. Variación de la electronegatividad (escala de Pauling) con respecto al número atómico.

La escala de Pauling presenta algunas limitaciones, ya que, por ejemplo, depende del número de oxidación del elemento. Aun así, su uso es muy conveniente para calcular energías de enlace entre elementos de diferente electronegatividad, así como para tener una idea cualitativa de la polaridad de los enlaces.

En 1934, **Robert Mulliken (1896-1986)** observó que cuando un elemento presenta una elevada energía de ionización y una elevada afinidad electrónica, genera una gran tendencia a adquirir electrones, más que a perderlos. Entonces, cuando este elemento forma parte de un compuesto químico, debe ser muy electronegativo. Al contrario: si tanto la energía de ionización como la afinidad electrónica de un elemento poseen valores bajos, ese elemento tendrá una marcada





tendencia a perder electrones en la formación de un compuesto y, por lo tanto, será un elemento muy electropositivo. Estas observaciones permitieron a Mulliken establecer una definición de electronegatividad, conocida como *electronegatividad de Mulliken*,  $X_M$ , que se define como el valor medio de la suma de la energía de ionización (I) y la afinidad electrónica ( $A_e$ ) de un átomo:

En ambas escalas de electronegatividad, se puede observar que la tendencia de la electronegatividad aumenta de izquierda a derecha con respecto a los periodos y, en el caso de las familias el crecimiento de la electronegatividad, es de abajo hacia arriba (Figura 3.14).

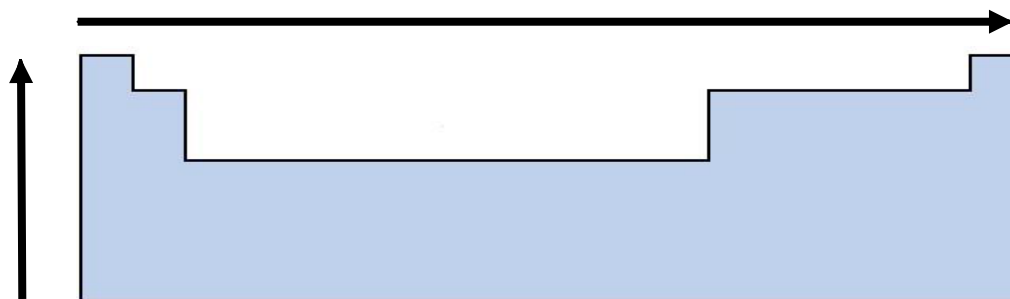


Figura 3.14. Representación del incremento de la electronegatividad en la tabla periódica.

### 3.5.2 Radio atómico

El *radio atómico* está definido como la distancia que hay entre el centro del núcleo y los electrones más externos que conforman al elemento. El crecimiento del radio en la tabla periódica puede ser descrito de la siguiente manera:

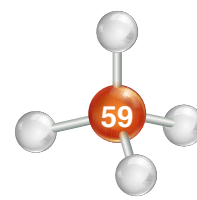
- En una familia, el radio atómico se incrementa de arriba hacia abajo.
- En un período, el radio atómico aumenta de derecha a izquierda (Figura 3.15). Debido a que cuando se desplaza uno de izquierda a derecha, se incrementa la carga positiva en el núcleo, la cual ejerce fuerzas de atracción superiores sobre los electrones de valencia, originando que el átomo se “contraiga”.



Figura 3.15. Sentidos en los que aumenta el radio atómico.

### 3.5.3 Primera energía de ionización

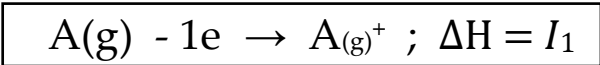
El concepto de *energía de ionización*, se refiere a la cantidad de energía necesaria para separar un electrón de la capa de valencia de un elemento en fase gaseosa: si se quita el primer electrón, la energía que se requiere se denomina *primera energía de ionización*, si se quita el segundo electrón, la energía necesaria se denomina *segunda energía de ionización*, y así sucesivamente (esquema 3.1). En textos especializados podemos documentar tablas desde la primera hasta la séptima







energía de ionización o más; es un hecho experimental que, a medida que el átomo pierde más electrones, la energía requerida es cada vez mayor.



Esquema 3.1. Representación de la primera energía de ionización

En cuanto a que el radio atómico disminuye de izquierda a derecha en un período, se concluye que se requiere mayor energía para extraer un electrón en un período a medida que uno se desplaza en ese sentido.

En cuanto a las familias, se debe esperar que la energía de ionización disminuya de arriba hacia abajo, ya que el radio atómico se incrementa en este mismo sentido, favoreciendo el proceso de pérdida de electrones, pues las fuerzas de atracción núcleo-electrón son menores cuando la distancia se incrementa. En la Figura 3.16 se muestran gráficamente los valores de la primera energía de ionización en función del número atómico.

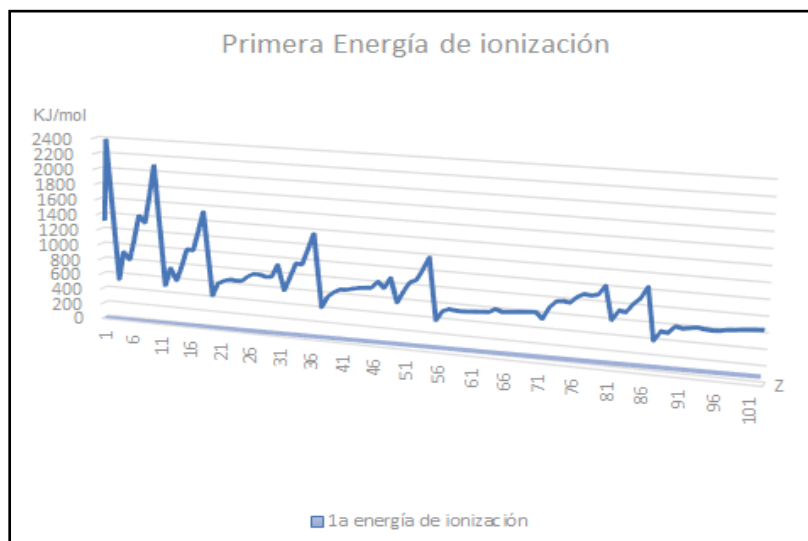


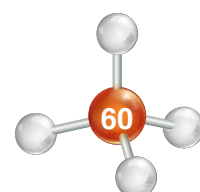
Figura 3.16. Representación gráfica de la primera energía de ionización contra Z.

### 3.5.4 Afinidad electrónica

La *afinidad electrónica* es definida como la variación de energía involucrada en el proceso mediante el cual un átomo en fase gaseosa gana uno o más electrones. Cuando un átomo al ganar electrones genera aniones, cuya configuración electrónica es muy estable (la de gases nobles) y libera energía. Cuando un átomo gana un electrón que se debe incorporar a un orbital de mayor energía que aquel orbital donde están ubicados los electrones de valencia, el proceso absorbe energía. Esto sucede, por ejemplo, con elementos que poseen la configuración electrónica  $ns^2$ , ya que el electrón que se incorpora debe ubicarse en un orbital p de mayor energía que el s. Los valores de afinidad electrónica no siguen una tendencia regular en la tabla periódica, como se observa en la Figura 3.17.

1							18
<b>H</b> -72.8	2	13	14	15	16	17	<b>He</b> >0
<b>Li</b> -59.6	<b>Be</b> >0	<b>B</b> -26.7	<b>C</b> -121.8	<b>N</b> 7.0	<b>O</b> -141.0	<b>F</b> -328.0	<b>Ne</b> >0
<b>Na</b> -52.6	<b>Mg</b> >0	<b>Al</b> -42.5	<b>Si</b> -133.6	<b>P</b> -72.0	<b>S</b> -200.4	<b>Cl</b> -349.0	<b>Ar</b> >0
<b>K</b> -48.4	<b>Ca</b> -2.4	<b>Ga</b> -28.9	<b>Ge</b> -119.0	<b>As</b> -78.0	<b>Se</b> -195.0	<b>Br</b> -324.6	<b>Kr</b> >0
<b>Rb</b> -46.9	<b>Sr</b> -5.0	<b>In</b> -28.9	<b>Sn</b> -107.3	<b>Sb</b> -103.2	<b>Te</b> -190.2	<b>I</b> -295.2	<b>Xe</b> >0
<b>Cs</b> -45.5	<b>Ba</b> -14.0	<b>Tl</b> -19.2	<b>Pb</b> -35.1	<b>Bi</b> -91.2	<b>Po</b> -186.0	<b>At</b> -270.0	<b>Rn</b> >0

Figura 3.17. Afinidades electrónicas de los elementos de los grupos principales [KJ/mol].





## 3.6 Aplicaciones en Ciencias de la Tierra

El conocimiento de la periodicidad química es fundamental para la comprensión de las propiedades de los elementos y de los compuestos. Muchos de los fenómenos que se observan en Ciencias de la Tierra, pueden explicarse y/o predecirse a partir del comportamiento que exhiben los elementos que pertenecen a una misma familia o a un mismo periodo. Este conocimiento finalmente conduce a diversas aplicaciones, como las siguientes:

### 3.6.1 Aleaciones y metalurgia

Un proceso ampliamente utilizado y estudiado desde hace siglos con una gran cantidad de aplicaciones es la unión de diversos metales conocido como *aleaciones*. Una aleación es la mezcla de dos o más metales, de uno o más metales con algún elemento no metálico. Existen diferentes procesos para obtener una aleación. El más antiguo consiste en la mezcla de los diversos elementos llevados a temperaturas de fusión y posteriormente enfriada la solución líquida, lo que forma una estructura definida y única para cada combinación.

Las aleaciones a partir de elementos metálicos han sido, a lo largo de la historia, un hito en cada etapa del avance tecnológico de la humanidad. Desde el uso del bronce para hacer armas, armaduras y diversas piezas para mejorar la calidad de vida de las sociedades, hasta el acero y las aleaciones más comunes empleadas en las grandes construcciones, se ha demostrado que los metales poseen inconmensurable importancia en la sociedad.

En nuestro tiempo las aleaciones han dejado de ser valoradas como avance tecnológico, no así su versatilidad y diversificada aplicación tanto utilitaria como para el desarrollo de nuevos materiales.

Un ejemplo es el desarrollo de materiales anticorrosivos para las tuberías que se emplean en los pozos petroleros y submarinos y el uso de materiales de alta dureza y resistencia a nivel industrial (Figura 3.18). Muchos trabajos se han enfocado en el desarrollo de polímeros anticorrosivos en películas empleadas como recubrimientos. Pese a estar en constante desarrollo e investigación, los resultados actuales son de gran utilidad. Citamos las investigaciones que se realizan con derivados de tiourea y átomos metálicos como inhibidores de la corrosión.

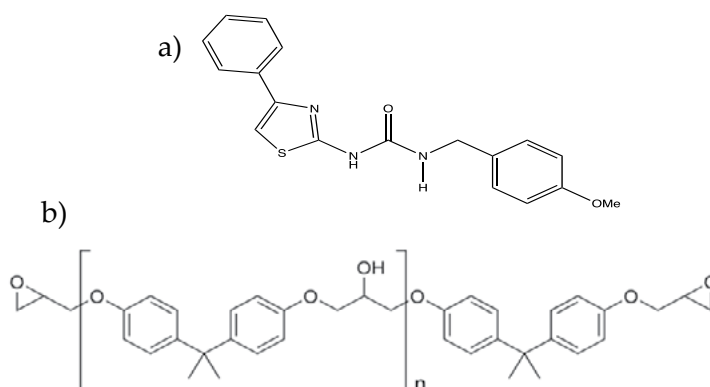


Figura 3.18. Moléculas que tienen propiedades anticorrosivas a) Derivado de tiourea b) material polimérico epoxilado.



El estudio de la periodicidad química es muy importante ya que las interacciones y reacciones químicas que se llevan a cabo entre diferentes sustancias (metales, no metales, materiales semiconductores, etc.) para formar diversos compuestos, está en función de la reactividad, estabilidad, tamaño de átomo, electronegatividad, afinidad electrónica y todas las propiedades descritas en la presente obra.

Los mejores conductores de corriente eléctrica o térmica son los metales, por lo que se han tomado como base para el desarrollo de superconductores, semiconductores y muchos materiales que, en su mayoría son no metálicos, pero no dejan de tener átomos metálicos en su estructura.

Los superconductores son un tipo especial de materiales que pueden conducir la corriente eléctrica casi sin ofrecer resistencia y, por tanto, sin que se produzca una “pérdida” energética. Una limitante de los metales es que se calientan al conducir un flujo de electrones, porque los átomos del metal vibran alrededor de sus posiciones de equilibrio, por lo que presentan resistencia al paso de la corriente eléctrica y se pierde energía en forma de calor, lo que provoca que disminuya su conductividad.

Por otra parte, al disminuir la temperatura, también lo hace la resistencia eléctrica del metal, originando que el material adquiera características superconductoras. Por estas razones los procesadores de computadoras, las baterías, los eliminadores de corriente, los transformadores, las plantas de luz eléctrica, etc., tienen grandes ventiladores o refrigerantes. En algunos casos es necesario enfriar con helio líquido, lo que es bastante costoso para la industria. Por ello la investigación en el desarrollo de superconductores de “alta temperatura” tiene singular relevancia en los niveles académicos e industriales. Las propiedades químicas predichas por la periodicidad de los elementos juegan un papel trascendente a nivel básico, ya que permiten anticipar y seleccionar el mejor metal para tales o cuales investigaciones y alcanzar exitosamente los objetivos.

Actualmente se conocen dos tipos de superconductores:

- **Superconductores de tipo I**, que impiden que los campos magnéticos penetren en ellos, es decir, los apantallan (efecto Meissner). Son elementos puros con una temperatura crítica muy baja.
- **Superconductores de tipo II**, son superconductores “imperfectos” que permiten que los campos magnéticos penetren en su interior, pasando gradualmente del estado superconductor al normal. Entre ellos se encuentran aleaciones y sustancias cerámicas.

Esta tecnología tiene una amplia aplicación en diversas áreas del conocimiento como es la química, física, ingeniería e incluso la medicina. Algunas de sus aplicaciones se encuentran relacionadas con sus propiedades magnéticas, siendo utilizados en campos tan dispares como el transporte, ya que, se emplean en trenes de alta velocidad; en países como Japón, se pretende disminuir la fricción levitando el tren con las propiedades superconductoras magnéticas y evitando el roce con las vías, lo cual permite un aumento de velocidad.

En medicina se emplean comúnmente en la fabricación de mejores equipos de Resonancia Magnética Nuclear. También se trabaja para emplearlos en el almacenamiento de energía.

Otras investigaciones, cuyos objetivos son el mejoramiento de los materiales con base en el conocimiento de las propiedades periódicas de los elementos, son los materiales piezoeléctricos. Estos materiales presentan un efecto muy característico conocido como el *efecto piezoeléctrico*, el cual lo poseen determinados cristales que, al ser sometidos a tensiones mecánicas, adquieren polarización eléctrica generando una diferencia de potencial con cargas eléctricas distribuidas en su superficie (Figura 3.19). Este fenómeno también se presenta a la inversa, esto es en la



deformación bajo la acción de fuerzas internas al ser sometidos a un campo eléctrico. Este efecto es utilizado en los alerones de los aviones, los cuales son sometidos a una gran tensión y resistencia, por lo que se evita su ruptura.

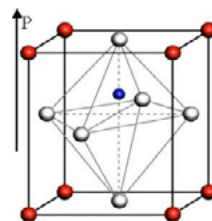
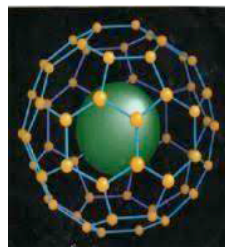
Entre los materiales piezoeléctricos se encuentran, por ejemplo, los cristales de cuarzo ( $\text{SiO}_2$ ). El desarrollo de estos materiales sólo es posible si se conocen las propiedades de los átomos que intervienen en la red cristalina de dichos cristales.

Muchas sustancias cristalinas poseen propiedades piezoeléctricas, pero solamente algunas se usan a escala industrial; entre ellos destacan el cuarzo, la sal de Rochelle, el titanato de bario y el fosfato dihidrogenado de amonio (ADP).

Entre las aplicaciones industriales y tecnológicas destacan el uso en altavoces de agudos (tweeters), pequeños altavoces, cápsulas (pick-up) de tocadiscos, encendido electrónico de calentadores y estufas a gas, hidrófonos (Geofísica), motores piezoeléctricos, sensores de vibración en guitarras eléctricas, recarga automática de baterías para teléfonos móviles y computadoras portátiles, reguladores de presión proporcional, neumáticos, sensores, transductores ultrasónicos (como los cabezales de los ecógrafos), transductores piezoeléctricos, transformadores piezoeléctricos, destartadores odontológicos de ultrasonido para la remoción del tártaro o "sarro" interdental, entre muchos otros.

Se ratifica que el estudio de la química básica es esencial para la comprensión y generación de nuevos materiales y es tan versátil que es capaz de ayudar a predecir el comportamiento de materiales de construcción o de almacenamiento de energía, ya que todo compuesto y elemento obedece las leyes de la física y la química. De tal manera se han desarrollado materiales como el hormigón translúcido, el cual es obtenido a partir de la fibra óptica o también de un polímero. La fibra óptica es una hebra muy fina de silicio o de vidrio y es conductora de la luz. El grosor de esta fibra no es mayor al de un cabello humano y tiene como sus componentes al láser, la fibra óptica y un fotodiodo (detector de luz). El conocimiento de la química también apoya en el desarrollo de pinturas y productos básicos como selladores, pegamentos, etc., útiles en oficios como la carpintería, la construcción, la mecánica, etc. En la actualidad existen pinturas que protegen la estructura y pueden encontrar fallas en la misma. Por ejemplo, una pintura ecológica que está siendo desarrollada en la Universidad de Strathclyde en Glasgow, Escocia, utiliza nanotecnología. Sus componentes proceden de productos reciclados como las cenizas volantes y nanotubos de carbón alineados que poseen propiedades semejantes al cemento y que son de fácil colocación.

a)



b)

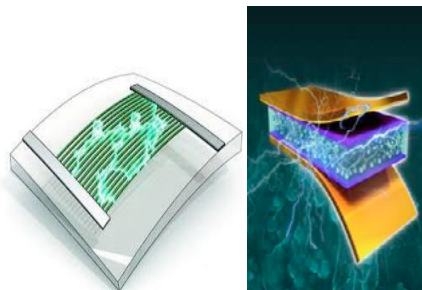


Figura 3.19. Materiales piezoeléctricos a) nanopartículas y celda cristalográfica de materiales con efecto piezoeléctrico. b) tecnología con materiales piezoeléctricos.





### 3.7 Autoevaluación

#### Cuestionario de autoevaluación del Capítulo 3

#### Cuestionario de autoevaluación del tema 3.1

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

1. La idea del átomo como partícula indivisible y unidad mínima de la materia fue propuesta por primera vez por el filósofo griego:

- a) Aristóteles      b) Dalton      c) Demócrito      d) Tito Lucrecio

2. Filósofo griego que postuló que las sustancias fundamentales eran tierra, aire, agua y fuego:

- a) Aristóteles      b) Dalton      c) Demócrito      d) Tito Lucrecio

3. Sustancia elemental que los alquimistas de la antigüedad creían que podía provocar la combustión de todas las demás sustancias:

- a) Flogisto      b) Piedra filosofal      c) Oro      d) Plata

4. Ley que establece que “La materia puede cambiar y formar sustancias nuevas, pero no surgir de la nada o desaparecer en ella”:

- a) Ley de la materia      b) Ley de la conservación de la materia  
c) Ley de la creación de la materia      d) Ley de la formación de la materia

5. La ley de la conservación de la materia fue enunciada por:

- a) Georg Stahl      b) Robert Boyle      c) Roger Bacon      d) Antoine Lavoisier

6. Elementos descubiertos a partir de la descomposición por electrólisis del agua:

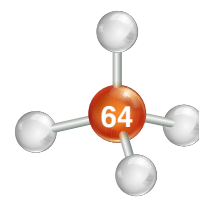
- a) Cloro y sodio      b) Hidrógeno y oxígeno  
c) Oxígeno y cloro      d) Sodio e hidrógeno

7. Uno de los primeros arreglos propuestos para clasificar los elementos consideraba las propiedades semejantes entre ellos y los acomodaba en grupos de tres. Este arreglo es conocido como las “tríadas” de:

- a) John Newlands      b) Johan Döbereiner  
c) Dimitri Mendeleiev      d) Emile Chancourtois

8. La primera propuesta de clasificación de los elementos que tomó como referencia la masa atómico e hizo evidente la tendencia regular (periodicidad) en los valores de esta propiedad de los elementos fue la elaborada por:

- a) John Newlands      c) Dimitri Mendeleiev  
b) Johan Döbereiner      d) Emil Chancourtois







9. La “Ley de las octavas” hace una analogía con la escala musical y ordena a los elementos conocidos en aquella época en grupos de ocho, de acuerdo con sus propiedades. Esta ley fue propuesta por:

- a) John Newlands
- b) Johan Döbereiner
- c) Dimitri Mendeleiev
- d) Emile Chancourtois

10. La tabla actual se basa en la periodicidad de las propiedades de los elementos y se deriva de los trabajos que, de manera independiente, realizaron los científicos Julius Lothar-Meyer y:

- a) John Newlands
- b) Johan Döbereiner
- c) Dimitri Mendeleiev
- d) Emile Chancourtois

### Cuestionario de autoevaluación del tema 3.2

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

1. Actualmente los elementos químicos aparecen ordenados de acuerdo con la ley que enuncia “los elementos están acomodados en orden de sus números atómicos crecientes y los que tienen propiedades químicas similares se encuentran en intervalos definidos”. Esta ley es llamada:

- a) Ley periódica
- b) Ley del gas ideal
- c) Ley de intervalos
- d) Ley de conservación

2. Los elementos con características y aplicaciones cotidianas similares (por ejemplo, los elementos representativos) se agrupan en:

- a) Bloques
- b) Periodos
- c) Clases
- d) Familias o grupos

3. Los renglones o filas en la tabla periódica acomodan a los elementos en orden creciente de su número atómico y se denominan:

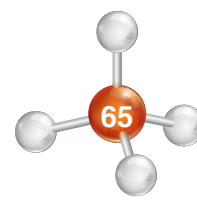
- a) Bloques
- b) Periodos
- c) Clases
- d) Familias o grupos

4. Cada una de las columnas de la tabla periódica agrupa a elementos con propiedades químicas semejantes y se llaman:

- a) Bloques
- b) Periodos
- c) Clases
- d) Familias o grupos

5. De acuerdo con el último subnivel electrónico que constituyen a cada uno de los elementos, éstos se agrupan en:

- a) Bloques
- b) Periodos
- c) Clases
- d) Familias o grupos





### Cuestionario de autoevaluación del tema 3.3

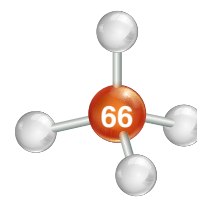
Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

1. Es una clasificación muy general de los elementos en la tabla periódica debido a sus características:
  - a) Metálicas, no metálicas, metaloides y gases nobles
  - b) Reactivas, no reactivas y neutras
  - c) Metálicas y no metálicas
  - d) Ninguna es correcta
2. Casi todos son elementos sólidos, con altos puntos de fusión y ebullición, con brillo, excelentes conductores de la corriente eléctrica y del calor además de dúctiles y maleables.
  - a) No metales
  - b) Metales
  - c) Metaloides
  - d) Gases nobles
3. Elementos que se encuentran en cualquier estado de agregación, con puntos de fusión y ebullición regularmente bajos, sin lustre, malos conductores del calor y de la electricidad, y no son dúctiles, ni maleables, sino más bien frágiles.
  - a) No metales
  - b) Metales
  - c) Metaloides
  - d) Gases nobles
4. Conjunto de elementos cuyo comportamiento químico puede variar dependiendo de con qué se combinan; pueden ser brillosos u opacos, su conductividad térmica y eléctrica es intermedia, algunos, incluso, son semiconductores y suelen ser muy maleables.
  - a) No metales
  - b) Metales
  - c) Metaloides
  - d) Gases nobles
5. Grupo de elementos en fase gaseosa, con puntos de fusión y ebullición muy bajos y tienen una estructura electrónica muy estable por lo que prácticamente no reaccionan.
  - a) No metales
  - b) Metales
  - c) Metaloides
  - d) Gases nobles

### Cuestionario de autoevaluación del tema 3.4

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

1. Número de protones presentes en el núcleo de un átomo. Permite ordenar a los elementos en la tabla periódica.
  - a) Masa atómica
  - b) Radio iónico
  - c) Radio atómico
  - d) Número atómico
2. Media ponderada del valor que corresponde a todos los isótopos de un elemento, teniendo en cuenta, además, su abundancia relativa.
  - a) Masa atómica
  - b) Radio iónico
  - c) Radio atómico
  - d) Número atómico





3. Unidad con la cual se expresa la masa de los elementos.  
a) gramo                      b) u.m.a.                      c) mol                      d) Angstrom
4. Distancia más probable entre el centro del núcleo de un átomo y el electrón más externo que conforma al mismo.  
a) Masa atómica                      b) Radio iónico  
c) Radio atómico                      d) Número atómico
5. Cuando un átomo gana o pierde un electrón se convierte en un ión, cuyo volumen se modifica y puede ser descrito a partir de su:  
a) Masa atómica                      b) Radio iónico  
c) Radio atómico                      d) Número atómico
6. Comportamiento general de los no metales al reaccionar con agua:  
a) Básico                      b) Neutro                      c) Ácido                      d) Halógeno
7. Compuestos formados por elementos metálicos de los grupos 1 y 2 al reaccionar con agua:  
a) Básico                      b) Neutro                      c) Ácido                      d) Halógeno
8. Arreglo tridimensional muy ordenado que pueden presentar los átomos de algunos elementos:  
a) Estructura cristalina                      b) Enlace químico  
c) Conductividad térmica                      d) Conductividad eléctrica
9. Capacidad de una sustancia de transferir la energía cinética de sus átomos a otros adyacentes, por la propagación de su movimiento térmico a través de un gradiente de temperatura.  
a) Estructura cristalina                      b) Enlace químico  
c) Conductividad térmica                      d) Conductividad eléctrica
10. Capacidad de un elemento de permitir el paso de los electrones a través de sí.  
a) Estructura cristalina                      b) Enlace químico  
c) Conductividad térmica                      d) Conductividad eléctrica

### Cuestionario de autoevaluación del tema 3.5

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

1. Es la capacidad que tienen los átomos de un elemento para atraer hacia sí los electrones de enlace con otro átomo en un compuesto dado.  
a) Radio atómico                      b) Electronegatividad  
c) Afinidad electrónica                      d) Energía de ionización

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

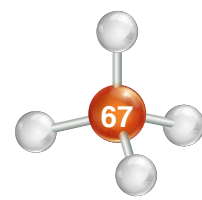
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

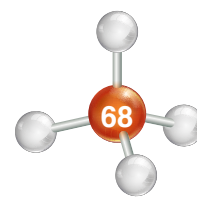
Cap. 21

Cap. 22





2. Propuso una escala de electronegatividad que asigna valores entre 0.6 y 4.0 a los elementos y que permite una valoración sencilla de la polaridad de los enlaces.
  - a) Robert Mulliken
  - b) Wolfgang Pauli
  - c) Linus Pauling
  - d) Gilbert Lewis
3. Su escala de electronegatividad toma en cuenta la semisuma de la energía de ionización y la afinidad electrónica para un elemento.
  - a) Robert Mulliken
  - b) Wolfgang Pauli
  - c) Linus Pauling
  - d) Gilbert Lewis
4. Se define como la distancia que existe entre el centro del núcleo y los electrones más externos que conforman al elemento.
  - a) Radio iónico
  - b) Radio atómico
  - c) Radio del núcleo
  - d) Radio de la molécula
5. Si se comparan los radios atómicos de los elementos de un mismo grupo de arriba hacia abajo, se observa que éste tiene una tendencia a:
  - a) Variar linealmente
  - b) Aumentar
  - c) Disminuir
  - d) Mantenerse constantes
6. Se define como la cantidad de energía necesaria para separar un electrón de la capa de valencia de un átomo en fase gaseosa:
  - a) Radio atómico
  - b) Electronegatividad
  - c) Afinidad electrónica
  - d) Energía de ionización
7. Nombre que se le asigna a la energía de ionización al quitarle el primer electrón al átomo:
  - a) Energía fundamental de ionización
  - b) Energía de ionización
  - c) Primera energía de ionización
  - d) Energía primordial de ionización
8. Al comparar las energías de ionización de un mismo elemento, se nota que de la primera a la segunda y de la segunda a la tercera energía de ionización, éstas suelen:
  - a) Variar linealmente
  - b) Aumentar
  - c) Disminuir
  - d) Mantenerse constantes
9. Es la variación de energía que tiene lugar cuando un átomo en fase gaseosa gana un electrón.
  - a) Radio atómico
  - b) Electronegatividad
  - c) Afinidad electrónica
  - d) Energía de ionización
10. Cuando un átomo gana un electrón que se debe incorporar a un orbital de mayor energía que aquel orbital donde están ubicados los electrones de valencia, el proceso:
  - a) Absorbe energía
  - b) Expulsa energía
  - c) Produce energía
  - d) Es isoenergético







# Capítulo 4

## Enlaces químicos y fuerzas intermoleculares

Ana Laura Pérez Martínez, Mitzty Josefina López López, Noé Santillán Piña

### 4.1 Introducción

En este capítulo se abordarán temas clave para que el alumno comprenda muchos de los fenómenos que se generan en la materia. En síntesis se verán temas como: los enlaces iónicos, los covalentes (puro, polar y coordinado), la Teoría de Enlace Valencia (TEV), las fuerzas intermoleculares, la estructura de Lewis, la Teoría de Repulsión de los Pares Electrónicos de la Capa de Valencia (TRPECV), la geometría molecular, las fases sólida, líquida y gaseosa, así como los fenómenos de superficie, las disoluciones y la conductividad eléctrica entre materiales iónicos en disolución; donde todos y cada uno de estos temas se relacionan entre sí, generando que el alumno integre todos los conocimientos necesarios y los aplique a lo largo de su carrera y en su vida profesional.

### 4.2 Teoría de Enlace Valencia (TEV). Enlaces covalentes: puro, polar y coordinado. Enlace iónico

El concepto *valencia* (del latín *valens*, *valentis* que significa valentía, vigor o capacidad), forma parte del arduo trabajo realizado por diversos científicos a lo largo de la historia, específicamente durante el siglo XIX. Con él se buscaba, fundamentalmente, encontrar un modelo racional capaz de explicar la combinación de los elementos químicos. Gracias al descubrimiento del electrón y su asociación con el enlace químico quedó confirmado que la valencia está relacionada con la cantidad de electrones externos, presentes en determinado átomo, al formar un enlace.

### Sumario

#### 4.1 Introducción

#### 4.2 Teoría de Enlace Valencia (TEV). Enlace covalente: puro, polar y coordinado. Enlace iónico.

#### 4.3 Fuerzas intermoleculares entre moléculas diatómicas

#### 4.4 Estructura de Lewis de moléculas sencillas

#### 4.5 Teoría de Repulsión de los Pares Electrónicos de la Capa de Valencia (TRPECV)

#### 4.6 Geometría Molecular y polaridad con respecto a átomos centrales

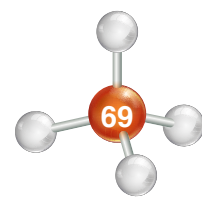
#### 4.7 Fases: sólida, líquida y gaseosa. Fenómenos de superficie: tensión superficial, capilaridad

#### 4.8 Disoluciones: diluidas, saturadas y sobresaturadas. Disoluciones verdaderas. Suspensiones y Coloides

#### 4.9 Conductividad eléctrica de materiales iónicos en disolución

#### 4.10 Aplicaciones en Ciencias de la Tierra

#### 4.11 Autoevaluación





Linus Pauling, reflexionando acerca de este concepto indicó (Pauling, 1960):

*“Si no existiese un orden en la manera de combinarse entre los diferentes elementos para formar las moléculas, sería necesario retener en la memoria todas las fórmulas de miles de sustancias. Afortunadamente, existe un gran orden en las fórmulas, como resultado de que ciertos elementos tienen un poder de combinación definido o valencia, que determina el número de otros átomos que pueden combinarse con estos elementos”.*

Actualmente, este concepto de valencia es empleado para describir la capacidad que tiene un elemento para combinarse con otro, en función de las fuerzas que actúan para mantener unidos a los átomos en combinación, dentro de un compuesto estable.

Por su parte, un **enlace químico** es definido como la unión de dos o más átomos. Existen tres tipos principales de enlaces, el covalente, el iónico y el metálico (este último no es mencionado en este apartado pues forma parte del contenido del capítulo 5).

#### 4.2.1 Enlaces químicos y tipos de enlace

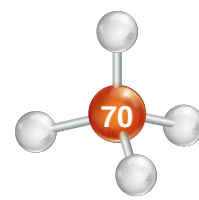
Como ya se mencionó, un enlace químico se define como la interacción eléctrica que genera la unión entre dos o más átomos (ya sea de la misma especie o de especies diferentes), con el fin de alcanzar la estabilidad al adquirir los átomos una configuración electrónica de gas noble.

Existen dos clasificaciones principales de enlaces, la primera que corresponde a tres tipos: los iónicos, los covalentes y los metálicos; y la segunda que son consideradas interacciones electrostáticas y, que corresponden a las fuerzas intermoleculares, mismas que se tratarán más adelante.

#### 4.2.2 Enlace iónico

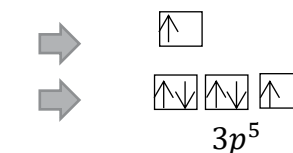
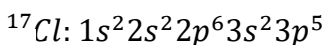
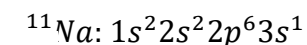
Este enlace se presenta cuando existe interacción eléctrica entre partículas cargadas. Dicha interacción se da entre especies con cargas opuestas, las cuales reciben el nombre de **iones**; entonces llaman **aniones** a las especies cargadas negativamente, y **cationes** a aquellos que están cargados positivamente (en el apéndice A, se presenta una tabla de iones monoatómicos y poliatómicos más comunes). Dentro del compuesto resultante, los iones se mantienen unidos gracias a fuerzas electrostáticas análogas a las fuerzas que actúan entre cargas eléctricas simples, de ahí que el enlace formado se conozca como **enlace electrovalente** o **enlace iónico**. Las propiedades típicas de los compuestos iónicos se presentan más adelante en el apartado 4.2.6.

Un enlace iónico se define, entonces, como aquel que se forma debido a la interacción electrostática entre iones de signo distinto, es decir, uno que es fuertemente electropositivo (que tiene baja energía de ionización) y otro fuertemente electronegativo (con alta afinidad electrónica). Veamos el caso de la halita, que es un mineral compuesto por cloruro de sodio (NaCl), ver figura 4.1.





La configuración electrónica de cada átomo es la siguiente:



Es mucho más fácil que el electrón del sodio, que se encuentra en su último nivel de energía, se transfiera al último nivel de energía del cloro. De esta manera, se logrará que ambos queden estables.

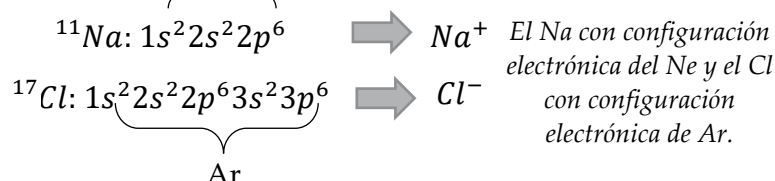
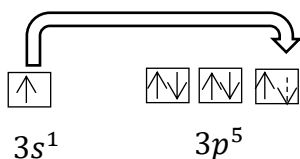


Figura 4.1 Configuración electrónica de la Halita.

**PROBLEMA TIPO**

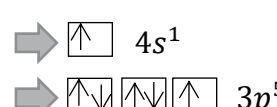
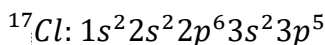
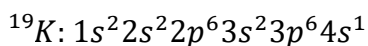
La silvina es un mineral del grupo de los haluros y está compuesto por los elementos potasio (K) y cloro (Cl):

- Determine el tipo de enlace que se forma entre dichos átomos.
- Determine la configuración electrónica del gas noble que adquirirían los dos átomos al formar el enlace.

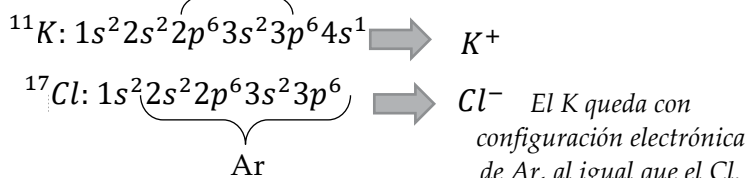
Solución:

a) El potasio tiene un solo electrón en su capa de valencia y el cloro tiene siete, por lo tanto, es mucho más fácil que el potasio le ceda ese electrón al cloro para que la estructura de la silvina se mantenga estable. Como el potasio le cede el electrón al cloro, se trata de una transferencia de electrones, es decir, de un enlace iónico.

b) La configuración electrónica de cada átomo es la siguiente:



Como se observa, es mucho más fácil que el electrón del potasio, que se encuentra en su último nivel de energía, se transfiera al último nivel de energía del cloro, de esta manera, se lograría que ambos quedaran estables.





### 4.2.3 Enlaces covalentes: puro, polar y coordinado

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

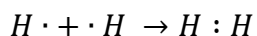
Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

En 1916, Gilbert Lewis propuso que la formación de un enlace implica que cada uno de los átomos compartan un electrón y describió la formación de dicho enlace para dos átomos de hidrógeno (H):



Es así como se ejemplifica un enlace covalente y se observa cómo dos electrones son compartidos por dos átomos. La representación de los electrones a manera de puntos es una forma gráfica denominada *Estructura de Lewis*, la cual se revisa su construcción más adelante en la sección 4.4.

Un *enlace covalente* es la unión de dos átomos que comparten los electrones que se encuentran en la capa más externa o de valencia. Este tipo de enlace está respaldado en la teoría de enlace valencia (TEV).

El *enlace covalente puro*, sucede cuando los átomos comparten, de manera equitativa, electrones para formar el enlace, siempre y cuando los átomos que participen pertenezcan al mismo elemento. En el enlace covalente puro la diferencia de electronegatividad es igual a cero.

Un *enlace covalente polar* se genera cuando los electrones enlazantes no son compartidos de forma equitativa por los átomos, esto se debe a que uno de los átomos es más electronegativo que otro, deformando la nube electrónica en el enlace.

Por último, el *enlace covalente coordinado o dativo* se forma cuando dos átomos comparten electrones, pero sólo uno de ellos aporta el par electrónico de enlace. El átomo que aporta el par de electrones se denomina *dador*, y el que lo recibe, *receptor*. Para que se lleve a cabo su formación es necesario que el átomo "dador" contenga un par de electrones libres en su orbital más externo (capa de valencia), y que el átomo "receptor" posea la capacidad de contener ese par de electrones en su capa de valencia. Algunas propiedades de este tipo de moléculas se presentan más adelante en la sección 4.2.6.

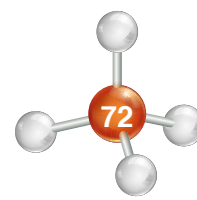
Para la representación de un compuesto en el que se emplean fórmulas desarrolladas, el enlace covalente coordinado se indica mediante el uso de una flecha ( $\rightarrow$ ), la cual apuntará hacia quien recibe el par electrónico de enlace. Veamos el ejemplo del ácido sulfúrico ( $H_2SO_4$ ), Figura 4.2:



Figura 4.2. Representación del Enlace Covalente Coordinado con las respectivas flechas que indican a los átomos receptores. Se debe tomar en cuenta a los electrones de valencia totales para poder acomodarlos de forma que cumplan la regla del octeto y tengan configuración electrónica de gas noble.

### 4.2.4 Teoría de Enlace Valencia (TEV)

La *Teoría de Enlace Valencia*, describe la formación de un enlace entre dos átomos al superponer o traslapar orbitales atómicos (Figura 4.3), lo que origina una zona común de alta densidad electrónica con dos electrones de espines apareados. Para que el enlace se lleve a cabo es necesario que los orbitales pertenezcan a la capa de valencia, la cual corresponde a la capa de electrones más externa ocupada en un átomo y, que contengan electrones desapareados y energía semejante.



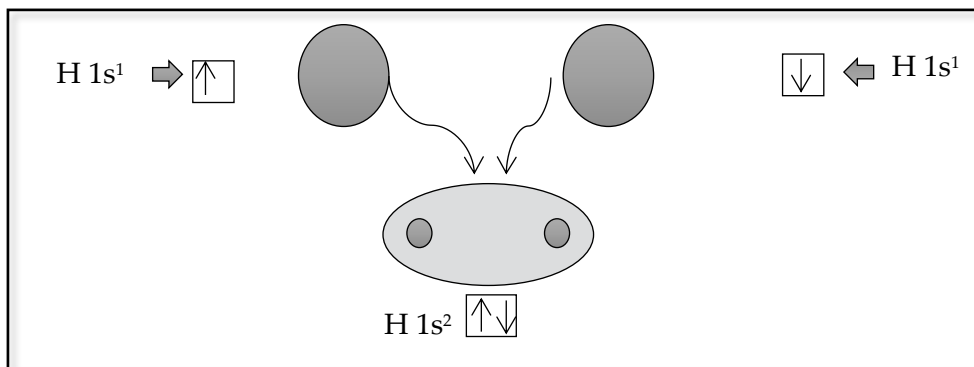


Figura 4.3. Representación del traslape de dos átomos de hidrógeno.

## 4.2.5 Polaridad de los enlaces covalentes

### 4.2.5.1. Polaridad en moléculas diatómicas

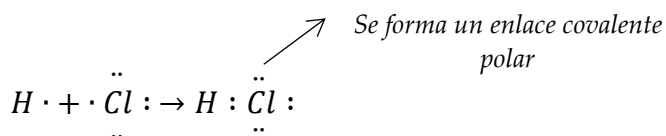
La **polaridad** se define como la capacidad que poseen las moléculas para ejercer interacciones electrostáticas. Esta característica está relacionada con las propiedades de solubilidad, punto de fusión y punto de ebullición de las sustancias.

Una **molécula diatómica** está formada por dos átomos, bien del mismo elemento (homonucleares) o bien de elementos diferentes (heteronucleares). Dentro de las moléculas diatómicas la polaridad es provocada por la diferencia de **electronegatividad** (propiedad periódica que indica la capacidad, habilidad o tendencia que tiene un átomo, en una molécula, para atraer electrones hacia sí mismo, en el apéndice A, se presenta el valor de las electronegatividades en la tabla periódica). Por ejemplo:

En el caso del ácido clorhídrico (HCl), la electronegatividad del cloro (Cl) es 3.0 y del hidrógeno (H) es de 2.1, entonces se tiene que:

$$\Delta EN = X_{Cl} - X_H = 3.0 - 2.1 = 0.9$$

La diferencia de electronegatividad es diferente de cero, por lo tanto, se trata de un enlace covalente polar.

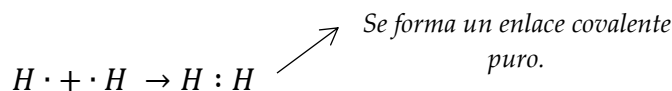


Veamos el ejemplo del hidrógeno diatómico:

La electronegatividad del hidrógeno es de 2.1, entonces:

$$\Delta EN = X_H - X_H = 2.1 - 2.1 = 0$$

La diferencia de electronegatividad es cero y, por lo tanto, se trata de un enlace covalente puro.



En moléculas diatómicas es posible emplear la diferencia de electronegatividad como un parámetro para determinar la polaridad del enlace covalente. Es importante indicar que a mayor diferencia de electronegatividad será también mayor el carácter polar de las mismas.

El carácter iónico es una expresión matemática que permite calcular la interacción iónica de un enlace, pero considerando que su complemento es la porción covalente. Esto debido a que en la

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

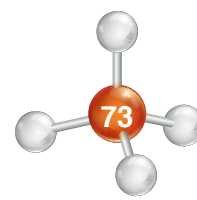
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22







naturaleza no existen enlaces totalmente iónicos o totalmente covalentes. El análisis del carácter iónico está relacionado íntimamente con el concepto de electronegatividad. El tipo de enlace que se genere puede variar de acuerdo con su polaridad, dependiendo de la diferencia de electronegatividad que existe entre los átomos.

La expresión matemática para calcular el carácter iónico es la siguiente:

$$\text{Carácter Iónico Porcentual} = \left( 1 - e^{-\left(\frac{\Delta EN}{4}\right)^2} \right) 100$$

La tabla 4.1 muestra cómo, a mayor carácter iónico, se incrementan algunas propiedades de los compuestos covalentes, de tal forma que se asemejan a los compuestos iónicos en sus propiedades. Las fuerzas electrostáticas presentes en las moléculas deben ordenarse y esto aportará mayor estabilidad al compuesto.

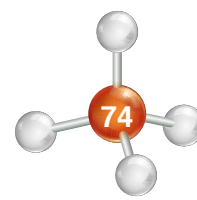
Diferencia de electronegatividad ( $\Delta EN$ )	Tipo de enlace	Densidad	Punto de ebullición	Solubilidad en agua	Intervalo de carácter iónico (%)
0.0	Covalente Puro	Aumenta ↓	Aumenta ↓	Aumenta ↓	0.0
0.1-0.7	Covalente simple				0.249-11.529
>0.7	Covalente polar				>11.529

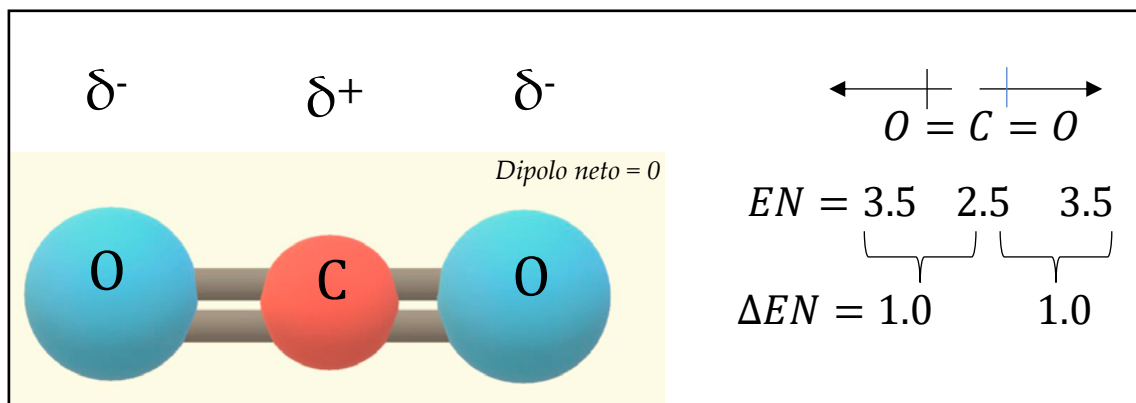
Tabla 4.1. Tipos de Enlace por su diferencia de electronegatividad.

#### 4.2.5.2 Polaridad en moléculas poliatómicas

En las *moléculas poliatómicas* (moléculas compuestas por más de dos átomos), la polaridad se cuantifica mediante el *momento dipolar*, definido como el producto de la magnitud de las cargas parciales, ya que éstas tienden a separarse a través del vector de desplazamiento que experimentan dichas cargas. Cada uno de los enlaces presenta un momento dipolar parcial; la suma de éstos pertenecerá al momento dipolar total de la molécula, el cual corresponde a la suma vectorial de todos los momentos dipolares de sus enlaces.

A continuación se presenta el ejemplo del dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), su polaridad puede ser representada como se observa en la Figura 4.4, donde el símbolo  $\delta^-$  sobre los oxígenos (O) indica una "carga parcial negativa". Esto significa que los O de la molécula son más negativos que el carbono (C). El símbolo  $\delta^+$  sobre el átomo de C indica una "carga parcial positiva", o que el C es positivo con respecto al O. Otra forma usual para indicar la polaridad de la molécula consiste en dibujar una flecha, de tal forma que la punta indique el extremo negativo del enlace (O) y la parte trasera cruzada de la flecha indique el extremo positivo (C). En conclusión, la separación de carga en un enlace covalente polar genera un dipolo eléctrico (dos polos): entre más grande sea la separación, más grande será el dipolo; es decir, entre mayor sea la diferencia de electronegatividad en una molécula, más grande será su dipolo.





4.4. Representación de la polaridad en la molécula de  $CO_2$

Aunque los enlaces de la molécula sean polares, la molécula puede resultar no polar, en virtud de su simetría; es decir, si al sumar de forma vectorial los dipolos parciales de cada enlace, el momento dipolar resulta ser cero, y entonces la molécula es no polar.

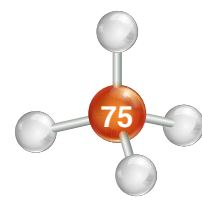
Una herramienta útil para determinar la polaridad de la molécula es obtenida con la teoría de repulsión de pares electrónicos de la capa de valencia (TRPECV) que se revisan más adelante en la sección 4.5.

#### 4.2.6 Propiedades de las sustancias de acuerdo al tipo de enlace

Existen ciertas propiedades de las sustancias, íntimamente relacionadas con el tipo de enlace que se genera entre las moléculas que las componen. Destacan la densidad, los puntos de ebullición y de fusión, la solubilidad, la conducción de corriente eléctrica, entre otras.

Por ejemplo: las sustancias que poseen *enlaces iónicos*:

- ❖ Presentan una densidad alta en comparación con las sustancias que presentan enlaces covalentes; sin embargo, los compuestos iónicos poseen menor densidad que los compuestos metálicos, debido a que ostentan estructuras con bajos números de coordinación.
- ❖ Poseen altos puntos de fusión (entre  $300^\circ C$  y  $1000^\circ C$ ) y de ebullición.
- ❖ Son solubles en agua y otros disolventes polares, pero ofrecen una baja solubilidad en disolventes orgánicos.
- ❖ Son capaces de conducir la corriente eléctrica cuando se encuentran en fase líquida o en disolución, en cuyo caso tienden a formar electrólitos.
- ❖ Los cristales iónicos son frágiles y pueden experimentar fracturas.
- ❖ Generalmente son sólidos estables con diferentes estructuras cristalinas (en el apéndice A, se presentan las estructuras cristalinas), como consecuencia de las atracciones electrostáticas que se generan entre los iones de cargas contrarias. Por ejemplo, en la halita (cloruro de sodio,  $NaCl$ ) (Figura 4.5), mineral que cristaliza en el sistema cúbico, el sodio se localiza en los vértices del cubo, mientras que el cloro se sitúa a su alrededor, debido a la atracción entre sus cargas. Esta disposición preferente de la estructura cristalina





determina las distintas propiedades del mineral, como su densidad ( $2.16 \text{ g/cm}^3$ ), su solubilidad en agua y sus puntos de fusión ( $\sim 801^\circ\text{C}$ ) y ebullición ( $\sim 1465^\circ\text{C}$ ).

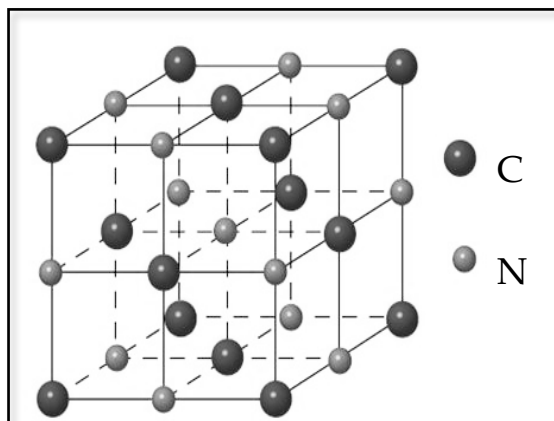


Figura 4.5. Formación de la estructura cristalina cúbica en la halita.



Figura 4.6. Ejemplo de un mineral de enlace covalente, cuarzo ( $\text{SiO}_2$ ).

Las principales propiedades de las sustancias con *enlaces covalentes* (Figura 4.6) son:

- ❖ Generalmente poseen densidades bajas.
- ❖ En condiciones ambiente, pueden existir en las fases gaseosa, sólida y líquida.
- ❖ En fase sólida poseen puntos de fusión y ebullición más bajos, comparados con las sustancias iónicas.
- ❖ Algunas son solubles en agua y otras en disolventes orgánicos.
- ❖ De manera general no son buenas conductoras de electricidad.

### 4.3 Fuerzas intermoleculares entre moléculas diatómicas

¿Qué mantiene unidas a las moléculas? La respuesta a esta interrogante es clave en la formación, el desarrollo y entendimiento de los compuestos químicos.

Una *molécula diatómica*, es aquella que está compuesta por dos átomos. Si un compuesto está formado exclusivamente por átomos del mismo elemento se denomina como *homonuclear*: el

hidrógeno ( $\text{H}_2$ ) o el oxígeno ( $\text{O}_2$ ), por ejemplo. En cambio, si un compuesto está formado por átomos de diferentes elementos se le conoce como *heteronuclear*: el monóxido de carbono ( $\text{CO}$ ), fluoruro de hidrógeno ( $\text{HF}$ ), óxido de hierro (II) ( $\text{Fe}_2\text{O}$ ) o la molécula de agua ( $\text{H}_2\text{O}$ ), son ejemplos.

#### 4.3.1 Fuerzas intermoleculares

Se conoce como *fuerzas intermoleculares* a las que se generan entre las moléculas que integran a una sustancia. Por lo general son de menor intensidad que las fuerzas de enlace y pueden ayudar a predecir o determinar algunas de las propiedades físicas de las sustancias. Por ejemplo, la densidad, el estado de agregación, el punto de fusión, el punto de ebullición, la solubilidad, la tensión superficial, etc.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

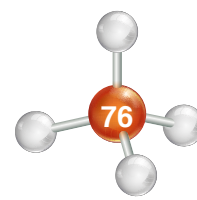
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





En la Figura 4.7 se presenta la clasificación más universal de las principales fuerzas intermoleculares.

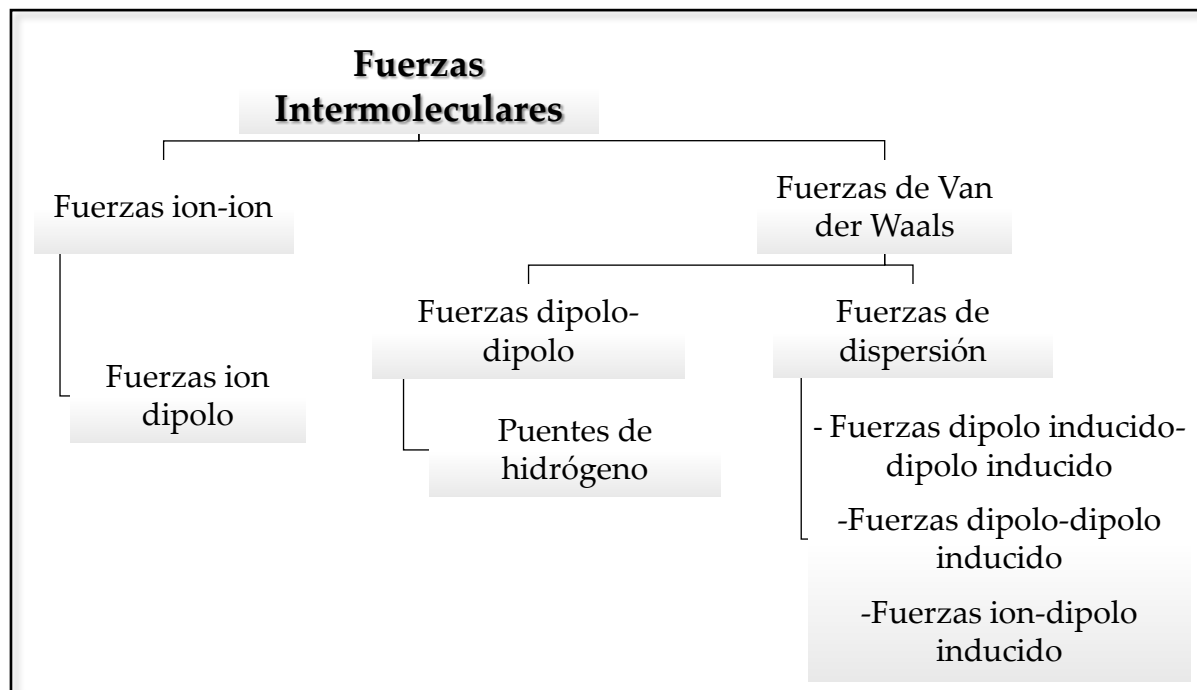


Figura 4.7. Clasificación de las fuerzas intermoleculares.

### 4.3.2 Fuerzas electrostáticas ion-ion

La ley de Coulomb establece que la fuerza entre dos partículas cargadas es directamente proporcional a la magnitud de las cargas e inversamente proporcional al cuadrado de la distancia que las separa (Figura 4.8). Las fuerzas ion-ion se establecen entre especies iónicas de cargas iguales o diferentes, bajo las siguientes premisas:

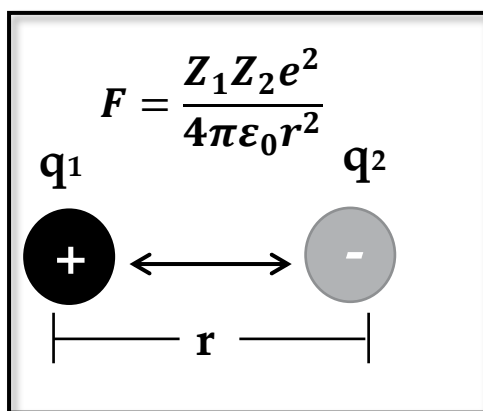
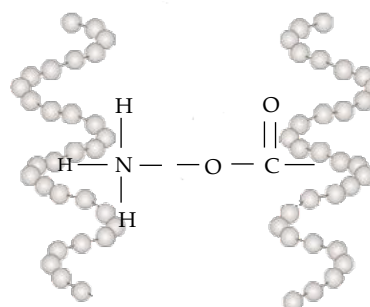


Figura 4.8. Ley de Coulomb aplicada a las fuerzas electrostáticas ion-ion.

- Los iones que poseen cargas de signo contrario se atraen.
- Los iones que poseen cargas con signos iguales se repelen.
- Son fuerzas unidireccionales.

Es común encontrar a este tipo de interacción en el llamado puente salino, ejemplificado en la relación existente entre una enzima y su sustrato, dentro de los aminoácidos de una proteína, o entre los ácidos nucleicos y las proteínas (Figura 4.9).

Figura 4.9. Se representa la disposición de un puente salino en una hebra de cabello (cadena polipeptídica de los aminoácidos)





### 4.3.2.1 Fuerzas ion-dipolo

Estas fuerzas son direccionales generadas por la atracción electrostática entre un ion y una molécula polar y son las responsables de la hidratación de los iones presentes cuando una sal es disuelta en agua. Por ejemplo, si se coloca a la halita (NaCl) en un recipiente con agua, la sal se disuelve debido a la atracción que existe entre los iones  $\text{Na}^+$  y  $\text{Cl}^-$  y los polos con carga opuesta que posee la molécula de agua. Los iones se separan mediante la hidratación, proceso en el cual un ion se ve rodeado por moléculas de agua. Dicho fenómeno consta de dos pasos: la **hidrólisis** (separación de los iones en presencia del agua), y la **solvatación** (proceso por el cual existe una atracción o asociación entre las moléculas de un disolvente y los iones de un soluto). En la Figura 4.10 se observa el rompimiento de los iones que componen a la sal y su consecuente solvatación.

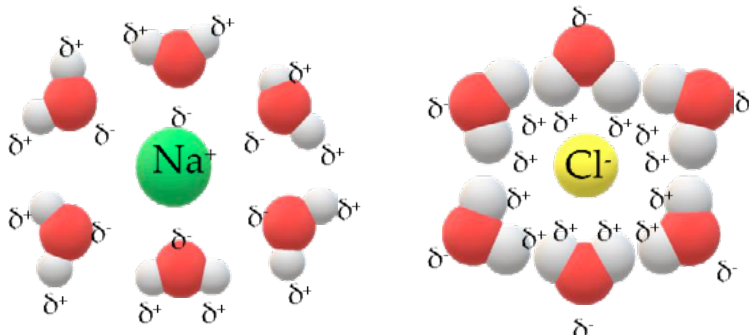


Figura 4.10. Representación de la hidratación del  $\text{Na}^+$  y  $\text{Cl}^-$ . Donde las moléculas de agua (rojas y blancas) se orientan de acuerdo a la polaridad de los iones de  $\text{Na}^+$  (verde) y  $\text{Cl}^-$  (amarillo).

Otro ejemplo de estas fuerzas se observa cuando se generan estructuras hidratadas de naturaleza cristalina como lo es el yeso ( $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ) (Figura 4.11).

### 4.3.3 Fuerzas de van der Waals

Este término agrupa a las fuerzas de atracción entre moléculas, ya sea polares o no polares. Se consideran generalmente débiles, pero juegan un papel muy importante puesto que se encuentran en múltiples procesos.

Las fuerzas de van der Waals incluyen:

- Fuerzas dipolo-dipolo y su caso específico: los puentes de hidrógeno.
- Fuerzas de dispersión (dipolo inducido-dipolo inducido, ion-dipolo inducido y dipolo-dipolo inducido).

#### 4.3.3.1 Fuerzas dipolo-dipolo

Estas fuerzas, de naturaleza electrostática, son generadas cuando el extremo positivo de una molécula polar interactúa con la parte negativa de otra molécula polar. Son relativamente débiles y su intensidad de atracción depende de la carga de su dipolo (Figura 4.12).



Figura 4.11. Rosa del desierto, es una variedad del yeso, básicamente un cristal de sulfato de calcio dihidratado que tiene un aspecto de rosa, se forma principalmente por evaporación.

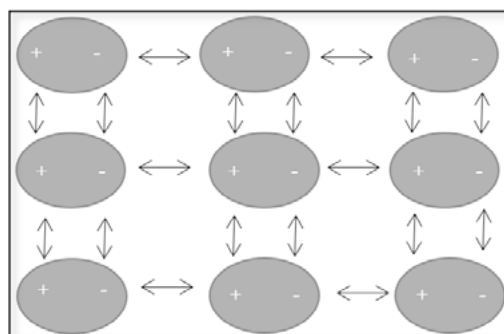


Figura 4.12. Disposición de las moléculas polares bajo fuerzas dipolo-dipolo.





### 4.3.3.1.1 Puentes de hidrógeno

Son un tipo especial de las fuerzas dipolo-dipolo y sólo se presentan entre moléculas que contienen enlaces covalentes O-H, N-H y F-H en su estructura (Figura 4.13). Se forma cuando un átomo de hidrógeno se encuentra unido mediante enlace covalente a un elemento con las siguientes características:

- Debe ser un elemento altamente electronegativo.
- Debe ser de un tamaño muy pequeño, capaz, por lo tanto, de aproximarse al núcleo del hidrógeno.

Dichas condiciones se cumplen para los átomos de flúor (F), oxígeno (O) y nitrógeno (N).

Como el agua (H<sub>2</sub>O) presenta este tipo de fuerza intermolecular; muchas de sus propiedades, revisadas en la sección 4.7 mas adelante de este capítulo, son debidas a los puentes de hidrógeno.

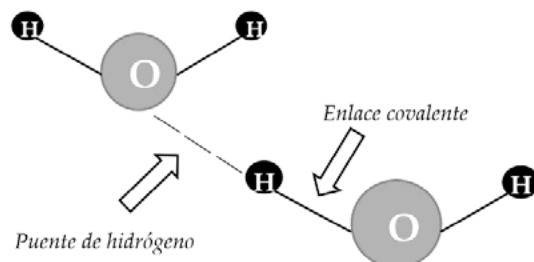


Figura 4.13. Representación de un puente de hidrógeno.

### 4.3.3.2 Fuerzas de dispersión

Estas fuerzas se establecen cuando un ion o una molécula polar, se acerca a una molécula no polar, debido a que la distribución electrónica de este último tiende a distorsionarse gracias a la fuerza que ejerce el ion o la molécula polar. Este proceso da lugar a una clase de dipolo, conocido como **dipolo inducido** en el que la separación de sus cargas positiva y negativa se debe a la proximidad del ion o una molécula polar.

Así, la atracción existente entre un ion y el dipolo inducido es conocida como **interacción ion-dipolo inducido**, por otro lado, la atracción generada entre una molécula polar y el dipolo inducido se le conoce como **interacción dipolo-dipolo inducido**.

#### 4.3.3.2.1 Fuerzas dipolo inducido-dipolo inducido

Estas fuerzas se generan cuando interaccionan entre sí, fundamentalmente, moléculas de tipo no polar, aunque también es posible que se presenten en sustancias polares. Las interacciones son relativamente débiles cuando actúan de forma separada, sin embargo, muy intensas al sumarse (Figura 4.14).

#### 4.3.3.2.2 Fuerzas ion-dipolo inducido

Estas fuerzas se forman cuando un ion se aproxima a una molécula no polar provocando la distorsión de su nube electrónica, lo que da lugar a una molécula polarizada de manera transitoria.

Por lo general se trata de una fuerza de naturaleza débil; sin embargo, permite explicar la disolución de ciertas sales en disolventes orgánicos o sustancias no polares, por ejemplo, si disolvemos Cl<sub>2</sub> en hexano (Figura 4.15A) o la interacción del ion Fe<sup>2+</sup> de la

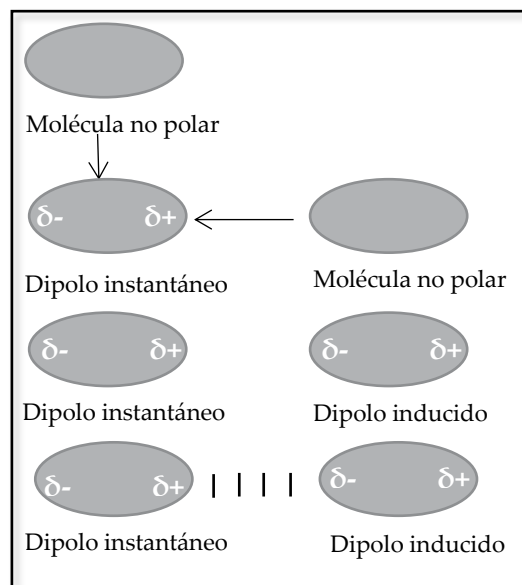


Figura 4.14. Interacción de la fuerza dipolo inducido-dipolo inducido, en la literatura también conocido como dipolo instantáneo-dipolo inducido.



hemoglobina y la molécula de  $O_2$  que es apolar (Figura 4.15B), esta interacción permite el transporte de oxígeno desde los pulmones hacia los tejidos.

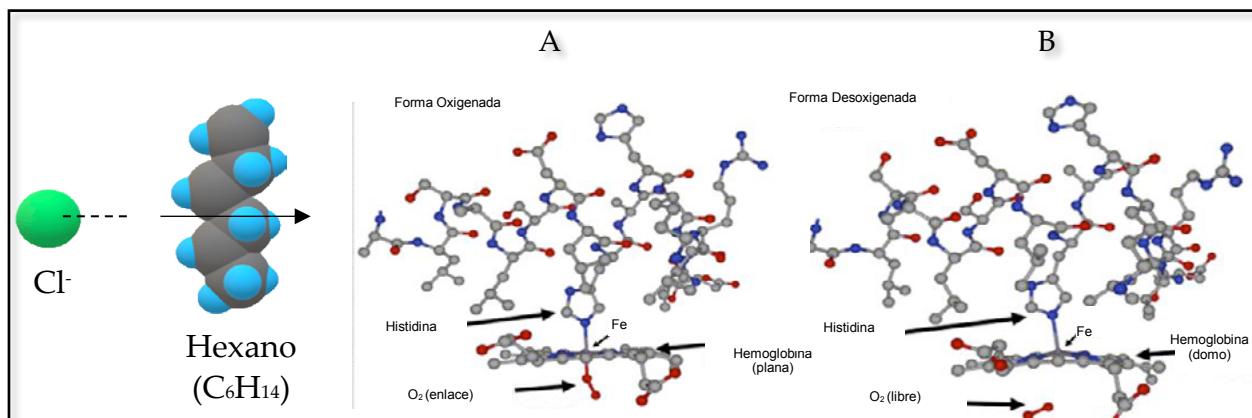


Figura 4.15A. Muestra la disolución del  $Cl_2$  en disolventes orgánicos como el hexano y Figura 4.15B. Refleja el ejemplo del ion  $Fe^{2+}$  y la molécula de  $O_2$

### 4.3.3.2.3 Fuerzas dipolo-dipolo inducido

Este tipo de fuerzas es generado por la interacción entre moléculas polares y moléculas no polares. Se forma debido a que la carga de una molécula polar provoca una distorsión en la nube electrónica de la molécula no polar, convirtiéndola, de manera transitoria, en un dipolo, y así se genera la atracción entre las moléculas.

La interacción es débil, empero permite explicar cómo es posible mezclar pequeñas cantidades de sustancias polares en sustancias no polares. Por ejemplo, gases apolares como el  $O_2$ ,  $N_2$  o el  $CO_2$  se pueden disolver en agua (Figura 4.16).

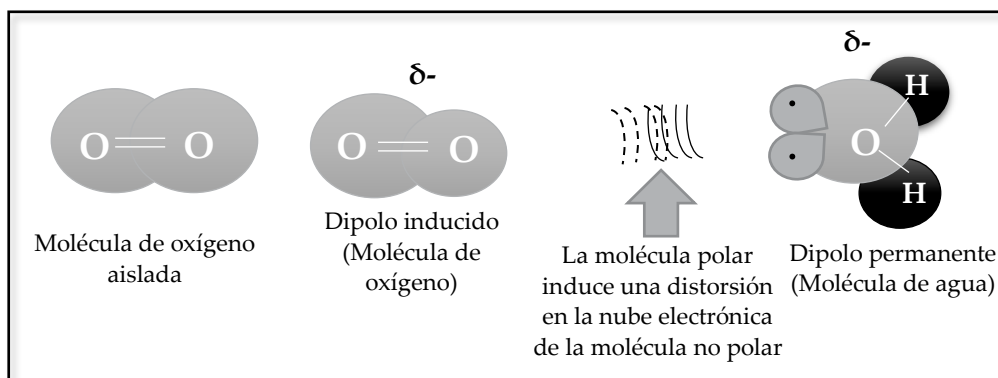
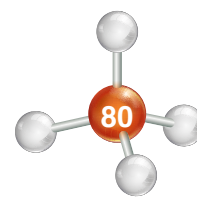


Figura 4.16. Representación de fuerzas dipolo-dipolo inducido entre la molécula de oxígeno y el agua.

En la tabla 4.2 se puede observar un resumen comparativo de los mecanismos de enlace y algunas de sus propiedades.

## 4.4 Estructura de Lewis de moléculas sencillas

El trabajo de **Gilbert Newton Lewis (1875-1946)**, físico y químico norteamericano, permitió explicar la formación del enlace covalente, a partir de la compartición de los electrones de las capas más externas ocupadas, siempre y cuando se cumpla la regla del octeto, de la cual se hablará más adelante en este apartado; con el fin de alcanzar su estabilidad y parecerse al gas noble más cercano.





Propiedad	Tipo o mecanismo de enlace			
	Iónico	Metálico	Covalente	Van der Waals
<b>Fortaleza</b>	Fuerte	Fuerte a generalmente moderado	Muy fuerte	Débil
<b>Mecánica</b>	Dureza moderada a alta; frágil	Dureza baja a moderada; alta plasticidad; dúctil, maleable	Dureza alta; frágil	Cristales suaves y algo plásticos
<b>Eléctrica</b>	Pobres conductores en fase sólida; líquidos y disoluciones conducen por transporte iónico	Buenos conductores; conducción por transporte de electrones	Aislantes en fases sólida y líquida	Aislantes en fases sólida y líquida
<b>Solubilidad</b>	Soluble en disolventes polares	Insolubles, excepto en los ácidos o álcalis por reacciones químicas	Muy baja solubilidad	Soluble en disolventes orgánicos para formar disoluciones
<b>Ejemplos</b>	Halita (NaCl); Fluorita (CaF <sub>2</sub> )	Cobre (Cu); Plata (Ag); Oro (Au)	Diamante (C); Esfalerita (ZnS)	Azufre (S); Grafito (C)

Tabla 4.2. Propiedades conferidas por el tipo o mecanismo de enlace. Imagen tomada y modificada de Klein, C. & Dutrow, B. (2012).

#### 4.4.1 Estructura de Lewis

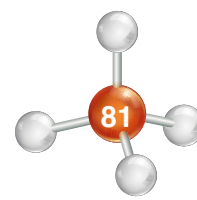
En 1916, Lewis desarrolló un modelo muy sencillo que permitió explicar la formación del enlace covalente, basado en la compartición de los electrones de la capa más externa del átomo (capa de valencia), fundamentalmente los presentes en los orbitales *s* y *p* más externos ocupados.

Se trata de una representación bidimensional muy sencilla que muestra los pares de electrones enlazantes (electrones que cada elemento posee para compartir con otro) y no enlazantes (par de electrones libres). Su importancia radica en que nos permite conocer la cantidad de electrones de valencia que interactúan, generando enlaces sencillos, dobles o triples. Además, se usa para entender la distribución de los electrones en la molécula.

#### 4.4.2 Regla del octeto

En 1917, Lewis postuló en su modelo la llamada **regla del octeto**, la cual establece que los átomos de los elementos tienden a enlazarse con el fin de completar sus últimos niveles de energía con una cantidad establecida de electrones, de tal manera que su configuración sea estable y se asemeje a la del gas noble más cercano. Dicha cantidad de electrones le concede el nombre a la regla: ya que es necesario que el átomo posea ocho electrones en su capa de valencia para que genere estabilidad, lo cual se logra en el momento en que los átomos comparten sus electrones.

Actualmente esta regla ha evolucionado debido a que existen compuestos estables que no la cumplen. En éstos se aplica el concepto del **octeto expandido** (éste se produce entre elementos del tercer período en adelante. Consiste en moléculas o iones en los que hay más de ocho electrones en la capa de valencia de un átomo).





### 4.4.2.1 Excepciones de la regla del octeto

Existen algunos elementos en los que la regla del octeto no se cumple. Tal es el caso de las *moléculas impares*, aquéllas que poseen números impares de electrones; de *las moléculas hipervalentes*, las que se generan cuando hay dos o más elementos que contienen más de ocho electrones en su capa de valencia o de las *moléculas hipovalentes*, las cuales comprenden aquéllas en las cuales existe un déficit de electrones en su capa de valencia. Son ejemplos de este tipo de excepciones el berilio, elemento capaz de formar compuestos mediante dos enlaces simples, logra su estabilidad con sólo cuatro electrones en su capa de valencia; el aluminio, el cual alcanza su estabilidad con apenas seis electrones, tiende a donar sus electrones y establecer, mediante enlaces simples, diferentes compuestos y el caso del boro, elemento que, al igual que el aluminio, logra su estabilidad con sólo seis electrones en su capa de valencia.

Otros elementos que tienden a no cumplir la regla del octeto cuando se enlazan con ciertos compuestos, pero que forman enlaces dobles o triples, son el carbono, el nitrógeno, el oxígeno y el azufre, por lo cual se debe estar muy pendiente de su estructura final.

### 4.4.3 Reglas para escribir la estructura de Lewis

Las siguientes son las reglas o pasos fundamentales para la correcta representación de la estructura de Lewis. Para facilitar su comprensión se acotan como ejemplos las moléculas: agua ( $H_2O$ ), trifluoruro de boro ( $BF_3$ ) e ion amonio ( $NH_4^+$ ).

- En primer lugar, se debe elegir al *átomo central*, generalmente es el menos electronegativo (con excepción del hidrógeno y el flúor, los cuales, frecuentemente se manejan como terminales, debido a que sólo pueden generar un enlace). Si se trata de moléculas constituidas únicamente por dos elementos, la escritura será lineal, colocando al más electronegativo hacia la derecha. En los compuestos orgánicos, el carbono se maneja como el átomo central, excepto en los éteres.
- En segundo lugar, conocer la cantidad de electrones presentes en su capa de valencia. En la molécula del agua, el hidrógeno se encuentra en la familia uno y posee, por tanto, un electrón en su capa de valencia, mientras que el oxígeno se encuentra en la familia seis, por lo que posee seis electrones en su capa de valencia (Figura 4.17).
- En tercer lugar, se deben contar los electrones con el fin de obtener los ocho indispensables para cumplir la regla del octeto y preservar su estabilidad.
- En cuarto lugar, se deben escribir los ligandos (los demás elementos), alrededor del átomo central, de la manera más simétrica posible (Figura 4.18).

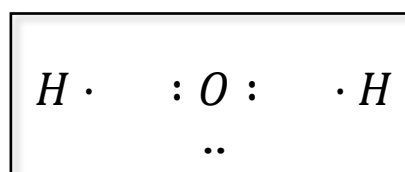
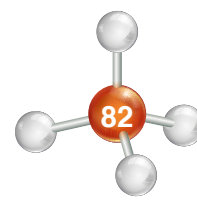


Figura 4.17. Representación de los electrones de la capa de valencia del oxígeno y del hidrógeno.



Figura 4.18. Representación de la simetría que debe existir entre los átomos.





- En quinto lugar, se debe dibujar un enlace (representado por un guión) para cada par de átomos conectados (Figura 4.19).
- En sexto lugar, se deben dibujar los electrones libres (representados por un par de puntos) con el fin de cumplir la regla del octeto para cada uno (Figura 4.20).
- Finalmente, si llegase a quedar algún o alguno de los átomos con su octeto incompleto, se sugiere escribir enlaces múltiples, con el fin de completarlo.

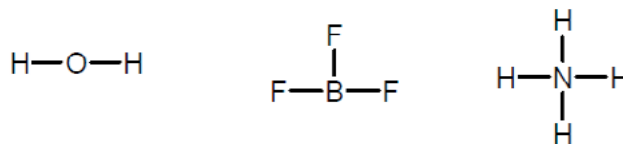


Figura 4.19. Representación de los enlaces por medio de guiones.

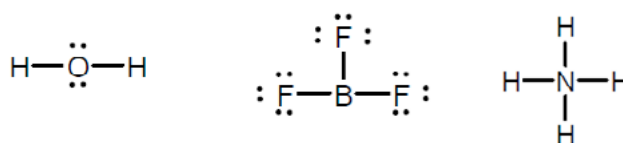


Figura 4.20. Electrones libres representados por un par de puntos.

#### 4.4.4 Metodología algebraica para escribir la estructura de Lewis

Esta metodología se usa únicamente para moléculas poliatómicas heteronucleares sencillas, que cumplan con la regla del octeto.

1. Obtener el número de electrones de valencia, éste se obtiene sumando el total de electrones presentes en la molécula:

$$\text{No. } e^- \text{ valencia} = \sum e^- c/\text{átomo}$$

2. Obtener el número de electrones individuales. Éste se obtiene multiplicando por ocho los electrones diferentes del hidrógeno, que son aquellos que necesitan completar el octeto, y sumarlos al número de hidrógenos, si los hay, multiplicados por dos, es decir:

$$\text{No. } e^- \text{ individuales} = (\text{no. } X)8 + (\text{no. } H)2;$$

*donde X, representa cualquier átomo diferente de H*

3. Obtener el número de electrones compartidos, el cual se obtiene de la diferencia entre el número de electrones individuales y el número de electrones de valencia.

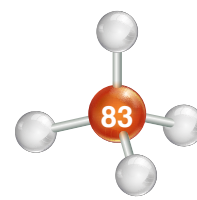
$$\text{No. } e^- \text{ compartidos} = \text{No. de } e^- \text{ individuales} - \text{No. de } e^- \text{ de valencia}$$

2. Obtener el número de enlaces, éste se obtiene de dividir el número de electrones compartidos entre dos, es decir:

$$\text{No. de enlaces} = \frac{\text{No. } e^- \text{ compartidos}}{2}$$

3. Por último, obtener el número de electrones libres, éste se obtiene de la diferencia entre el número de electrones de valencia y el número de electrones compartidos, es así que:

$$\text{No. } e^- \text{ libres} = \text{No. } e^- \text{ valencia} - \text{No. } e^- \text{ compartidos}$$







Por ejemplo, para el ácido nítrico ( $\text{HNO}_3$ ):

1. Número de electrones de valencia:

$$\text{H}: 1 \times 1 = 1$$

$$\text{N}: 5 \times 1 = 5$$

$$\text{O}: 6 \times 3 = 18$$

$$1 + 5 + 18 = 24 e^-$$

2. Número de electrones individuales:

$$(4)8 + (1)2 = 34 e^-$$

3. Número de  $e^-$  compartidos:

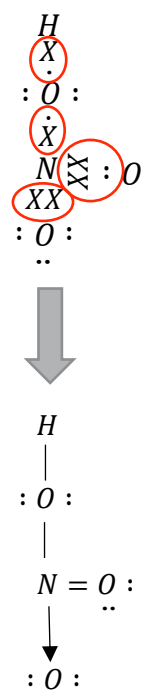
$$34 - 24 = 10 e^-$$

4. Número de enlaces:

$$\frac{10}{2} = 5 \text{ enlaces}$$

5. Número de electrones libres:

$$24 - 10 = 14 e^-$$



Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

## 4.5 Teoría de Repulsión de los Pares Electrónicos de la Capa de Valencia (TRPECV)

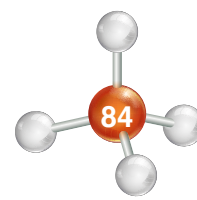
Esta teoría permite predecir, para los electrones de valencia, qué distancia de separación existe entre ellos, con el fin de minimizar las repulsiones en la molécula y, con ello, pronosticar su geometría.

La TRPECV fue propuesta inicialmente por Sidgwick y Powell en los años cuarenta; sin embargo, fueron Gillespie y Nyholm sus principales desarrolladores, quienes la extendieron posteriormente, por ello es conocida también con el nombre de estos dos personajes.

La teoría se basa en el grado de repulsión electrostática que existe entre los pares de electrones de valencia que se encuentran alrededor del átomo ya que éstos, se repelen entre sí. Esto genera que adopten una disposición espacial determinada, la cual tratará de minimizar dicha repulsión, especificando así, la geometría molecular.

Son importantes las siguientes observaciones:

- Dentro de una molécula, los átomos están enlazados mediante pares electrónicos; es posible que exista más de un par involucrado en el enlace.
- Algunos átomos poseen pares de electrones que no están involucrados en el enlace (electrones libres o no enlazantes).
- Tanto los pares de electrones enlazantes como los libres tienden a tomar posiciones espaciales donde la interacción entre ellos sea mínima, debido a que están cargados negativamente.
- Los pares de electrones libres suelen ocupar un espacio o volumen mayor que los enlazantes.





En síntesis, si tenemos una molécula o ion poliatómico de tipo  $AB_n$ , donde A es el átomo central y B los átomos ligandos, podemos predecir su geometría, la cual estará condicionada por la repulsión electrostática existente entre los pares de electrones de la capa de valencia alrededor del átomo central. El ordenamiento de grupos de electrones alrededor del átomo central se denomina **grupos de electrones de valencia**.

Según la TRPECV, la molécula o ion será más estable cuando los grupos de electrones del átomo central (enlazados o libres), estén lo más separados posible. La distribución de estos grupos de electrones alrededor del átomo central se conoce como **geometría electrónica del átomo central**. Por ejemplo, si hay dos grupos de electrones alrededor del átomo central, tendremos la mayor estabilidad cuando éstos se dispongan en lados opuestos al átomo central (**distribución lineal**), ya que es aquí donde se repelen entre sí lo menos posible (Figura 4.21).

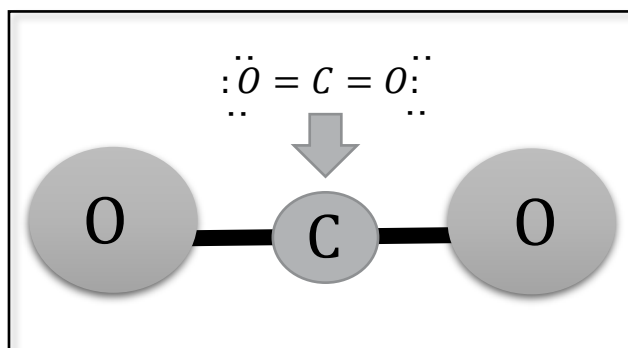


Figura 4.21. Representación de la geometría electrónica lineal de la molécula de dióxido de carbono.

La Tabla 4.3 ilustra la geometría electrónica en función del número de electrones del átomo central.

Grupo de e <sup>-</sup> del átomo central	Geometría electrónica			Modelos de barras y esferas
	Orientación de los grupos de e <sup>-</sup>	Descripción de los ángulos de enlace	Dibujo Lineal	
2		Lineal; 180°		
3		Trigonal plana; 120°		
4		Tetraédrica; 109.5°		
5		Bipiramidal trigonal; 90°, 120°, 80°		
6		Octaédrica; 90°, 180°		

ge= grupo de electrones

Tabla 4.3. Geometría electrónica. Información tomada y modificada de Klein, C. & Dutrow, B. (2012).



### 4.5.1 Interacciones repulsivas entre los pares de electrones en una molécula

Conforme a la intensidad de repulsión entre los pares de electrones en una molécula, existen tres tipos de *interacciones repulsivas*, las cuales, ordenadas de mayor a menor valor de repulsión, se enuncian de la siguiente manera:

1. Repulsión par no enlazante - par no enlazante (PNE-PNE).
2. Repulsión par no enlazante - par enlazante (PNE-PE).
3. Repulsión par enlazante - par enlazante (PE-PE).

Es decir,  $PNE-PNE > PNE-PE > PE-PE$

Como es válida esta división en dos clases de pares (enlazantes y no enlazantes), cualquier molécula podrá expresarse como  $AB_nE_m$ , donde “ $n$ ” es el número de pares enlazantes y “ $m$ ” el de pares no enlazantes. Ambos son números enteros.

Entonces, la repulsión par no enlazante - par no enlazante (PNE-PNE) es considerada más fuerte que la repulsión par no enlazante - par enlazante (PNE-PE), y ésta, a su vez, es más fuerte que la repulsión par enlazante - par enlazante (PE-PE). Por lo tanto, el ángulo que se forme entre dos pares enlazantes será más pequeño que el formado por los PNE-PE y éste, a su vez, más pequeño que el formado por los PNE-PNE.

El que la repulsión PNE-PNE, sea la interacción con mayor intensidad, y por lo mismo, la que conserva un ángulo de apertura mayor que el de las demás interacciones, se debe a que en los electrones no enlazantes se concentra la mayor dispersión de la nube electrónica.

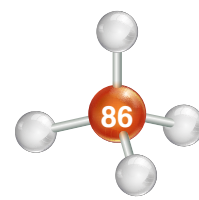
### 4.5.2 Reglas para determinar la geometría de una molécula, basadas en la TRPECV

La geometría de una molécula puede ser determinada con base en las siguientes reglas:

- 1) Apoyándonos en la estructura de Lewis, se puede deducir el número de pares de electrones presentes en el átomo central, los cuales pueden ser enlazantes o libres.
- 2) Al escribir los pares de electrones (sean enlazantes o libres) que rodean al átomo central, se deben orientar de forma que estén lo más alejados posibles, esto con el fin de que las repulsiones entre ellos sean mínimas.
- 3) Los pares de electrones no enlazantes o libres ocuparán más espacio sobre la superficie del átomo central que los pares enlazantes.
- 4) Los pares de electrones enlazantes múltiples (dobles o triples) ocupan más espacio que los sencillos.
- 5) Los pares de enlace que pertenecen a elementos electronegativos ocuparán menos espacio que los que pertenecen a los elementos electropositivos.
- 6) La geometría molecular es determinada por la posición que ocupan los átomos periféricos o ligandos.

## 4.6 Geometría Molecular y polaridad con respecto a átomos centrales

Se reitera que la estructura de Lewis es una sencilla representación bidimensional que muestra los pares de electrones enlazantes y no enlazantes y la TRPECV se basa en el grado de repulsión electrostática que existe entre los pares de electrones de valencia presentes alrededor del átomo, los cuales se repelen entre sí, adoptando una disposición espacial determinada, la cual tratará de minimizar dicha repulsión, determinando la geometría molecular. Conocer secuencialmente estos temas nos permite entender fácilmente cómo es que las moléculas se disponen de forma





tridimensional y posibilita la predicción de la geometría molecular, la cual influye en algunas propiedades físicas y químicas de las sustancias.

#### 4.6.1 Moléculas polares y su influencia en la geometría molecular

Ratificando que los enlaces covalentes polares son generados debido a la compartición desigual de electrones entre dos átomos con diferente electronegatividad ( $\Delta EN > 0$ ). Si se trata de moléculas diatómicas heteronucleares, es decir, moléculas con dos átomos diferentes, la polaridad generada por el enlace da lugar a la formación de una molécula polar. De esta forma, toda la molécula actúa como un dipolo.

Cuando existe una molécula con más de dos átomos unidos por enlaces polares, es necesario considerar la distribución de los dipolos de enlace resultantes, para deducir si la molécula es o no polar y facilitar la aplicación de la TRPECV, la cual permite inferir la distribución de los átomos en la molécula; después, se procede a determinar si los dipolos de enlace se encuentran distribuidos de manera que se puedan cancelar (si la molécula es no polar) o no (si la molécula es polar).

Por ejemplo, si tenemos una molécula triatómica heteronuclear de la forma  $AX_2$  (donde A es el átomo central y X los átomos periféricos), puede adoptar las geometrías ilustradas en la Figura 4.22.

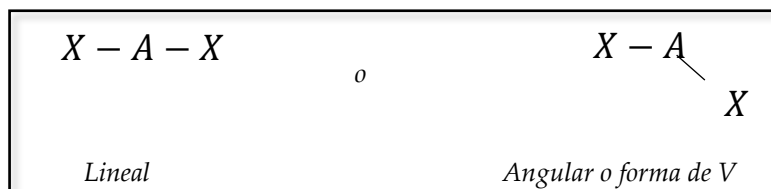


Figura 4.22. Geometría lineal (izquierda). Geometría angular o en forma de V (derecha).

Si el átomo X tiene mayor electronegatividad que el átomo A, cada enlace A-X será polar. Entonces, el extremo negativo del dipolo de enlace deberá apuntar hacia X. Los dipolos son representados mediante un vector electrónico con magnitud y dirección. En el caso de la distribución lineal, la magnitud de los dipolos de enlace es igual; sin embargo, poseen dirección opuesta, de tal manera que se cancelan para dar lugar a una molécula no polar (Figura 4.23).

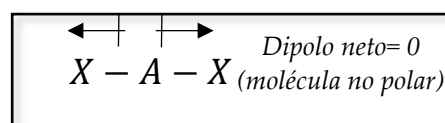


Figura 4.23. Molécula no polar.

En la distribución angular o en forma de V, dipolos iguales no se cancelan; al contrario, se suman para producir un momento dipolar mayor a cero, es decir representará una molécula polar (Figura 4.24).

Para que una molécula sea polar debe cumplir las siguientes condiciones:

1. Debe existir al menos un enlace polar o un par de electrones no enlazantes en el átomo central.
2. Los enlaces polares, si existiera más de uno, deben tener una distribución que no cancele su polaridad (dipolo de enlace) y, si hay dos o más pares de electrones no enlazantes en el átomo central, deben tener una distribución que no cancele su polaridad.

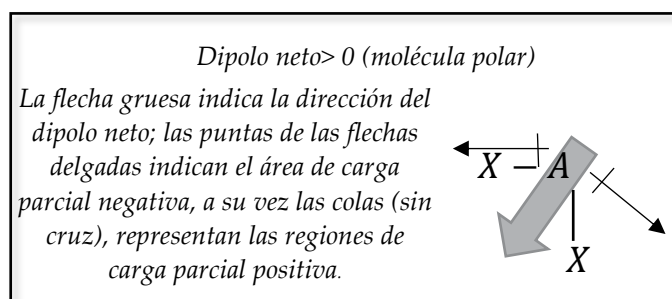
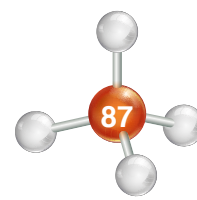


Figura 4.24. Molécula polar.





Es decir, si no existen enlaces polares o pares de electrones libres en el átomo central, la molécula no podrá ser polar.

### 4.6.2 Geometría molecular

La *geometría molecular* o *estructura molecular* se refiere a la disposición espacial de los átomos que constituyen la molécula y está determinada por la orientación relativa de sus enlaces covalentes. Esta disposición influye en las propiedades físicas y químicas de la molécula, como el color, la fase, la polaridad, el magnetismo, etc. Vale la pena establecer la diferencia entre *geometría electrónica* y *geometría molecular*. La molecular excluye a los pares de electrones libres y sólo toma en cuenta la distribución de los átomos enlazados alrededor del átomo central, mientras que la electrónica, se refiere a la distribución geométrica de todos los grupos de electrones alrededor del átomo central.

La geometría molecular está determinada por:

- Distancia de enlace  $\longrightarrow$  distancia en línea recta, entre los núcleos de los átomos enlazados.
- Ángulo de enlace  $\longrightarrow$  ángulo formado entre dos enlaces que contienen un átomo en común.

Los *pares electrónicos de enlace* (nubes electrónicas enlazantes) están formados por dos, cuatro o seis electrones compartidos por dos átomos. Dependiendo de los electrones que se compartan el enlace será *sencillo* (dos electrones compartidos), *doble* (cuatro electrones compartidos) o *triple* (seis electrones compartidos) (Figura 4.25)

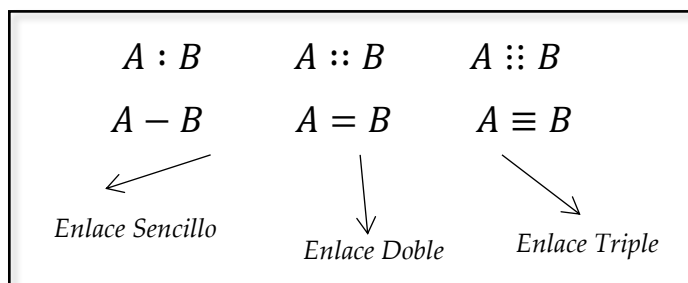


Figura 4.25. Representación de los diferentes tipos de enlace correspondientes a la cantidad de electrones compartidos.

### 4.6.3 Clasificación de las geometrías moleculares

Existen cinco tipos principales de geometrías moleculares (Figura 4.26).

Por otro lado, se encuentran los pares electrónicos libres o no enlazantes, los cuales se forman por dos electrones no compartidos de un átomo en una molécula, también se les conoce como nube electrónica libre y se representa como se muestra en la Figura 4.27.

Antes de comenzar a predecir la geometría de una molécula, es necesario conocer cuántos grupos de electrones se encuentran asociados al átomo central. Es aquí donde la estructura de Lewis sirve de herramienta, ya que, al escribirla, es más sencillo ver el comportamiento de los pares electrónicos (de enlace y libres).

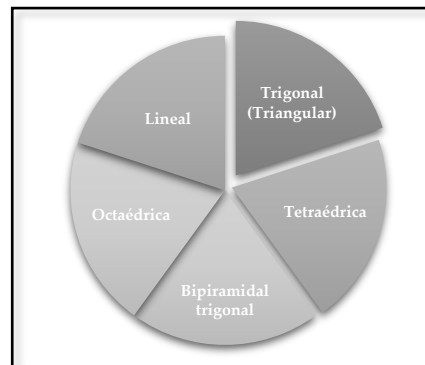


Figura 4.26. Los cinco tipos de geometrías moleculares.

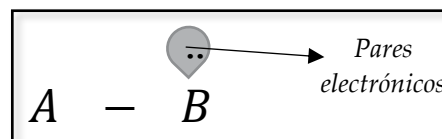
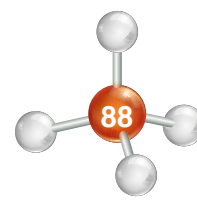


Figura 4.27. Representación de los pares electrónicos libres o no enlazantes.





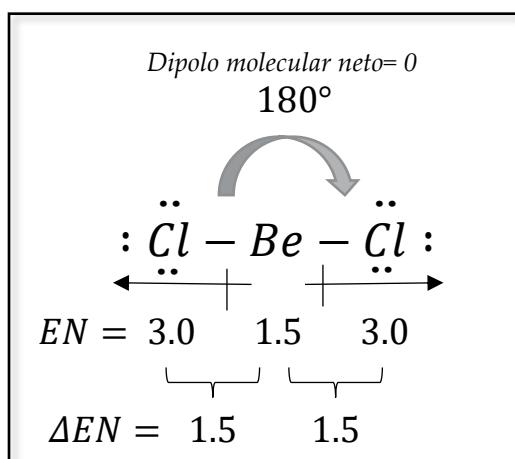


Después, se debe observar cómo se pueden distribuir los grupos de electrones, de forma que la repulsión entre ellos sea mínima (TRPECV).

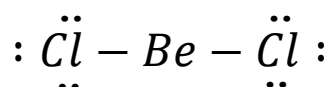
La geometría de la molécula estará determinada por la distribución espacial de los enlaces que en ella aparecen y no por la posición de los pares electrónicos no enlazantes o libres. Sin embargo, éstos sí deberán ser tomados en cuenta en el momento de determinar la disposición espacial de todos los grupos electrónicos, sean enlazantes o no.

#### 4.6.3.1. Geometría molecular lineal

La notación de esta geometría es de la forma AX<sub>2</sub> (A: átomo central, X: átomos periféricos), es decir, consta de un átomo central más dos átomos de otro elemento. En general se trata de moléculas que forman un ángulo de enlace de 180°, que representa la mayor estabilidad debido a que los grupos de electrones estarán lo más separados posibles entre sí, generando una mínima repulsión entre ellos, y se puede representar de la siguiente forma:



Un ejemplo ilustrativo es el cloruro de berilio (BeCl<sub>2</sub>), cuya estructura de Lewis se escribe:



Siguiendo la TRPECV, los dos pares de electrones del Be forman un ángulo de 180°, y como ambos pares son enlazantes, se predice una geometría molecular lineal (Figura 4.28).

Se observa una gran diferencia de electronegatividad y que cada enlace es polar. Los dos dipolos son de igual magnitud, pero con dirección opuesta. Por lo tanto, la suma vectorial es cero y entonces es no polar.

Figura 4.28. Geometría molecular lineal para el cloruro de berilio (BeCl<sub>2</sub>).

#### 4.6.3.2 Geometría molecular trigonal (triangular)

La notación de esta geometría es de la forma AX<sub>3</sub> (A: átomo central, X: átomos periféricos), es decir, consta de un átomo central más tres átomos de otro elemento. Existen dos vertientes para describir esta disposición, aunque, generalmente los ángulos de enlace son de 120°: la primera posee los tres pares de electrones enlazados, formando así, la geometría molecular **trigonal plana**, también conocida como **triángulo equilátero** (AX<sub>3</sub>). La segunda se trata de la geometría electrónica, que posee dos pares de electrones de enlace y un par de electrones libres, formando así, la geometría **trigonal angular o en forma de V** (AX<sub>2</sub>). La geometría molecular **trigonal plana** está representada en la Figura 4.29.

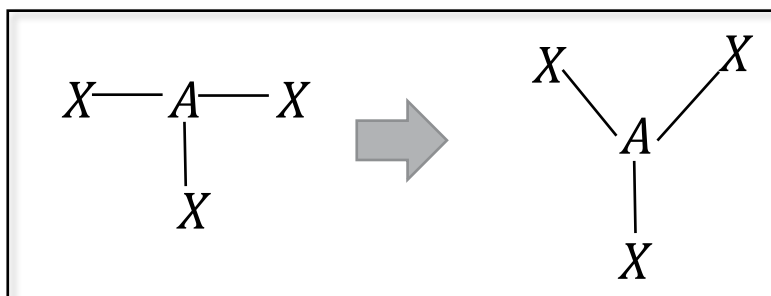
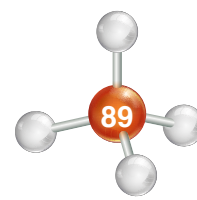


Figura 4.29. Representación de la geometría trigonal plana.





La representación de la geometría *trigonal angular* o *en forma de V* es la siguiente (Figura 4.30):

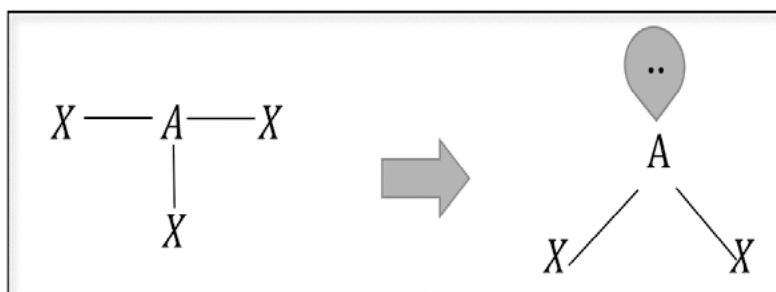


Figura 4.30. Representación de la geometría trigonal angular o en forma de V.

Veamos el caso del trifluoruro de boro (Figura 4.31):

En esta molécula, el boro es el átomo central y posee tres grupos de electrones de enlace que son los tres átomos de flúor. Siguiendo la TRPECV, se puede predecir la geometría electrónica trigonal plana, debido a que su estructura crea la separación máxima entre los tres grupos, generando un ángulo de enlace de  $120^\circ$  en un plano.

Debido a que el átomo de boro no posee pares de electrones libres, cada átomo de flúor ocupará el vértice de un triángulo equilátero, obteniendo así la geometría molecular citada (Figura 4.32).

La diferencia de electronegatividad es muy grande y los enlaces son muy polares. Sin embargo, los tres dipolos de enlace son simétricos; por lo mismo, se cancelan para dar lugar a una molécula no polar (Figura 4.33).

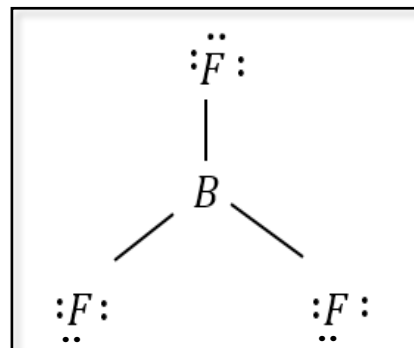


Figura 4.31. Estructura de Lewis del trifluoruro de boro.

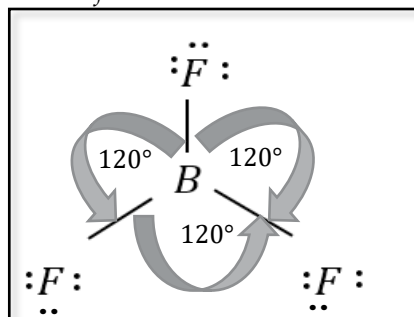


Figura 4.32. Geometría molecular trigonal plana para el trifluoruro de boro.

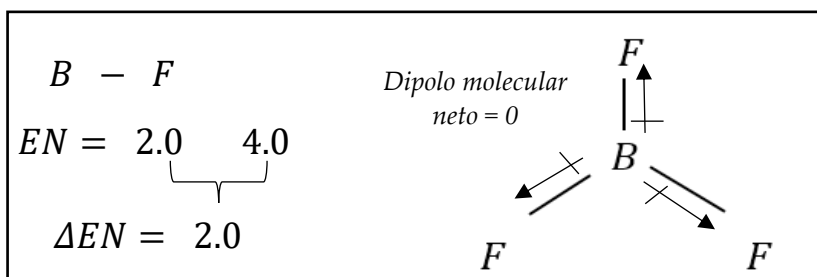
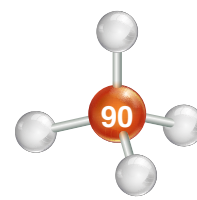


Figura 4.33. Polaridad de la molécula de trifluoruro de boro.

### 4.6.3.3 Geometría molecular tetraédrica

La notación de esta geometría es de la forma  $AX_4$  (A: átomo central, X: átomos periféricos), es decir, consta de un átomo central más cuatro átomos de otro elemento. Existen tres vertientes, aunque, generalmente, los ángulos de enlace son de  $109.5^\circ$ . La primera posee los cuatro pares de electrones enlazados, formando así, la geometría molecular *tetraédrica* ( $AX_4$ ) (Figura 4.34a). La segunda y la tercera vertiente corresponden a geometrías electrónicas. Entonces, la segunda posee tres pares de electrones de enlace y un par de electrones libres, formando así la geometría *pirámide trigonal* ( $AX_3$ ) (Figura 4.34b). Por último, la geometría *tetraédrica angular* o *en forma de V* ( $AX_2$ ), consta de dos pares de electrones de enlace y dos libres (Figura 4.34c).



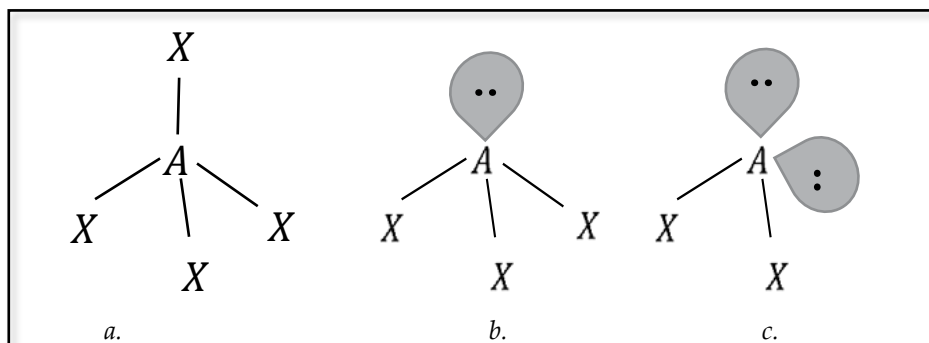


Figura 4.34a. Geometría molecular tetraédrica. Figura 4.34b. Geometría piramidal trigonal. Figura 4.36c. Geometría angular o en forma de V.

Para ilustrar el caso de  $AX_4$ , se presenta como ejemplo el tetrafluoruro de carbono  $CF_4$ , y su estructura de Lewis se escribe de la Figura 4.35.

En esta molécula el carbono es el átomo central y los cuatro átomos de flúor son los átomos periféricos, los cuales se localizan en los vértices de un tetraedro regular y cuya disposición según la TRPECV, se genera debido a la máxima separación entre estos cuatro y el átomo central. Puede predecirse como una geometría molecular tetraédrica, para una molécula tipo  $AX_4$ , sin electrones no enlazantes en el átomo central y con un ángulo de enlace de  $109.5^\circ$  (Figura 4.36).

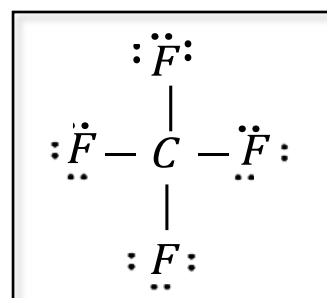


Figura 4.35. Estructura de Lewis del tetrafluoruro de carbono.

Como se observa en la Figura 4.37, los enlaces individuales son muy polares, además los dipolos de enlace están dirigidos hacia afuera del carbono. Como se trata de una molécula muy simétrica, los dipolos de enlace se cancelan, convirtiéndose en una molécula no polar. Esto se cumple para moléculas de tipo  $AX_4$  en las que no hay pares de electrones libres en el elemento central y los cuatro átomos X son idénticos.

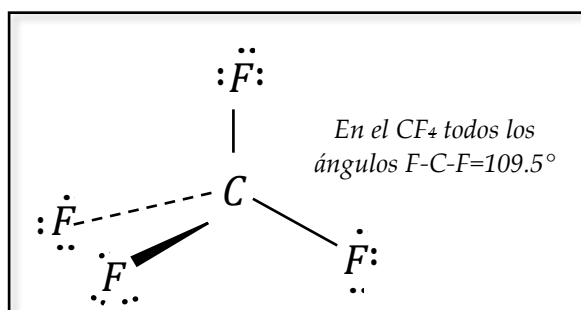


Figura 4.36. Geometría molecular tetraédrica de tetrafluoruro de carbono.

Cuando se trata de una molécula tetraédrica en la cual los átomos periféricos no son iguales, dicha molécula suele ser polar y su grado de polaridad depende del tamaño relativo de los dipolos de enlace presentes. La presencia de dipolos desiguales producirá que la molécula sea polar.

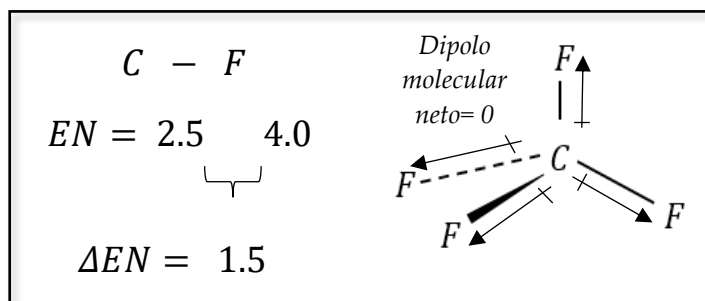


Figura 4.37. Polaridad de la molécula de tetrafluoruro de carbono.

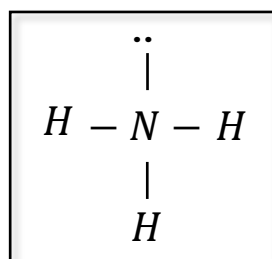
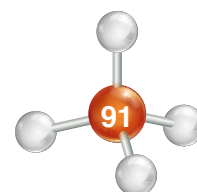


Figura 4.38. Estructura de Lewis del amoníaco.

Por otro lado, se tiene la geometría molecular tetraédrica **pirámide trigonal** ( $AX_3$ ), en la cual existen tres pares de electrones de enlace y un par de electrones libres. Un ejemplo ilustrativo es el amoníaco  $NH_3$  (Figura 4.38).





Tomando como base la TRPECV, podemos predecir que los cuatro grupos de electrones alrededor del átomo central se dispondrán en los vértices del tetraedro, debido a que de esta forma se da la máxima separación, por lo que toma la geometría electrónica tetraédrica (Figura 4.39).

En cuanto a la geometría molecular, el átomo de nitrógeno ocupa la cima de una distribución pirámide trigonal, mientras que los átomos de hidrógeno ocupan los vértices de la pirámide. Por tanto, la geometría de la molécula de amoniaco se describe como pirámide trigonal (Figura 4.40):

En contraste con la geometría tetraédrica, en la pirámide trigonal los ángulos de enlace H-N-H son menores que el tetraédrico ideal con  $107.3^\circ$ , esto se debe a que existe un par de electrones no enlazante (no compartido o libre). Los pares electrónicos no compartidos ocupan más espacio que los pares enlazados, aunado a las fuerzas de repulsión existentes entre PNE-PE (par no enlazante-par enlazante) (Figura 4.41).

Debido a la dirección de los dipolos de enlace en  $\text{NH}_3$  el extremo rico en electrones de cada enlace N-H, reside en el átomo central. Así, en la molécula de amoniaco, los dipolos de enlace refuerzan el efecto del par no compartido. Por tanto, la molécula es muy polar (Figura 4.42).

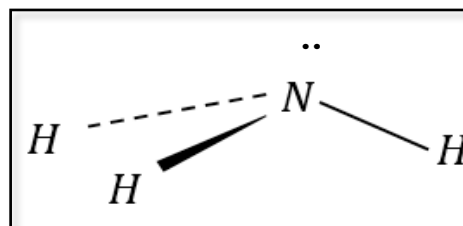


Figura 4.39. Geometría electrónica del amoniaco.

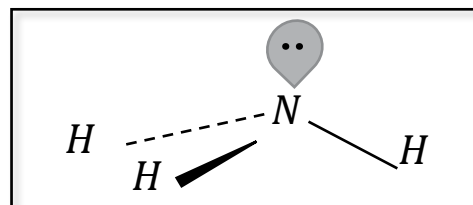


Figura 4.40. Geometría molecular trigonal del amoniaco.

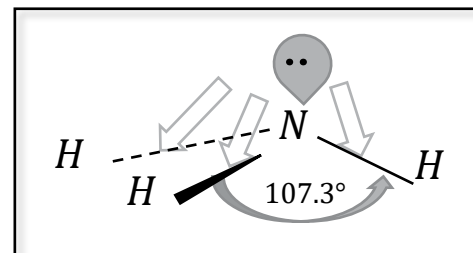


Figura 4.41. Repulsiones de la molécula de amoniaco, las flechas gruesas indican que la repulsión PNE-PE es más fuerte que la repulsión PE-PE.

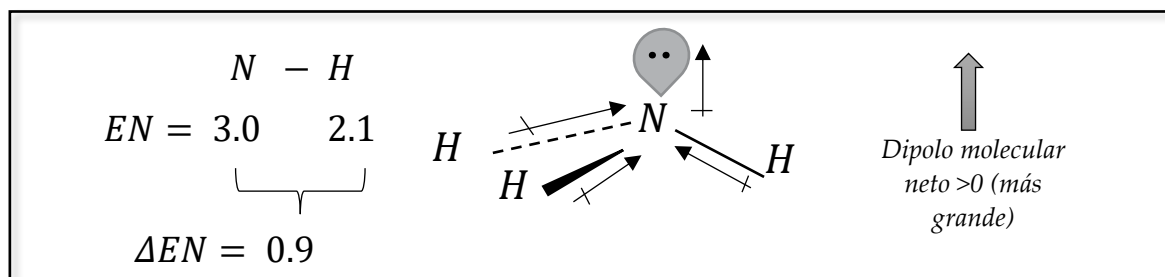


Figura 4.42. Polaridad de la molécula de amoniaco.

Incluída en la geometría tetraédrica está **la angular o en forma de V**, la cual consta de dos pares de electrones de enlace y dos libres. El agua  $\text{H}_2\text{O}$  es un ejemplo (Figura 4.43):

La molécula de agua tiene un ángulo de enlace de  $104.5^\circ$  y es muy polar. Mediante la TRPECV se puede predecir cómo los cuatro pares de electrones que se encuentran alrededor del átomo central, de manera ideal, deberían tener una separación de  $109.5^\circ$  en una distribución tetraédrica; sin embargo, el ángulo de enlace H-O-H es de  $104.5^\circ$ . Esto se debe a que los dos pares no compartidos presentan mayor impedimento estérico entre sí, lo mismo que entre los pares

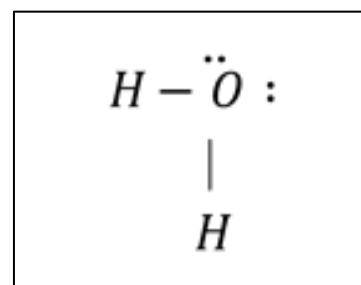
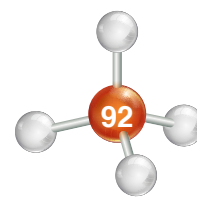


Figura 4.43. Estructura de Lewis del agua.





enlazantes, lo cual genera que éstos últimos estén más cerca. El resultado es una disminución en el ángulo de enlace.

La diferencia de electronegatividad es grande (Figura 4.44). Los enlaces O-H son muy polares y los dipolos de enlace refuerzan el efecto de los dos pares no enlazantes. Por tanto, esta molécula es muy polar. Cabe destacar que la molécula de agua posee ciertas propiedades inusuales, las cuales se explican, en parte, por esta gran polaridad.

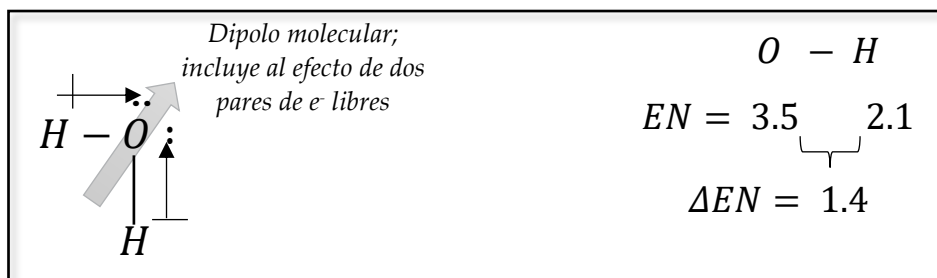
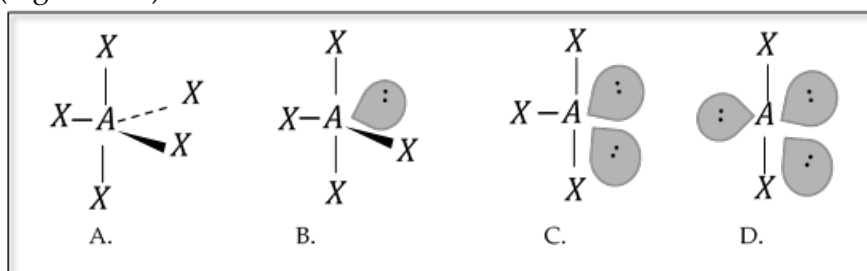


Figura 4.44. Polaridad de la molécula de agua.

#### 4.6.3.4 Geometría molecular bipiramidal trigonal

La notación de esta geometría es de la forma  $AX_5$  (A: átomo central, X: átomos periféricos), es decir, consta de un átomo central más cinco átomos de otro elemento. Existen cuatro vertientes, aunque, generalmente, los ángulos de enlace son de  $120^\circ$  y  $90^\circ$ . La primera posee los cinco pares de electrones enlazados, formando, así, la geometría molecular **bipiramidal trigonal** ( $AX_5$ ) (Figura 4.45A), la segunda, tercera y cuarta tienen, al menos, un par de electrones no enlazantes. En cuanto a la segunda, posee cuatro pares enlazantes y un par libre, generando así, la geometría **tetraedro irregular**, también conocida como **sube y baja** ( $AX_4$ ) (Figura 4.45B). La tercera vertiente, ostenta tres pares enlazantes y dos pares no compartidos, lo que genera la geometría **en forma de T** ( $AX_3$ ) (Figura 4.45C), por último, en la cuarta tenemos dos pares enlazantes y tres pares no enlazantes. Obteniendo así, la geometría **lineal** ( $AX_2$ ) (Figura 4.45D). Se ejemplifica esta descripción con el pentafluoruro de fósforo  $PF_5$  (Figura 4.46)

Figura 4.45A. Bipiramidal trigonal. B. Tetraedro irregular o sube y baja. Figura C. En forma de T. D. Lineal



Las moléculas que componen el  $PF_5$  están dispuestas de forma tal que generan una bipirámide trigonal, poliedro con seis caras compuestas por dos pirámides unidas mediante una base triangular o trigonal. A partir de la TRPECV, se sabe que los grupos de electrones que se encuentran alrededor del átomo central, en este caso del fósforo, deben estar lo más separados posibles. Esta separación se logra cuando los cinco pares enlazantes, en este caso, los de flúor se colocan en los vértices alrededor del fósforo, el cual se dispone al centro de la pirámide.

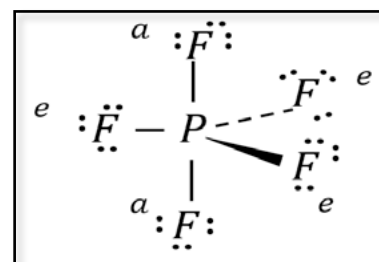
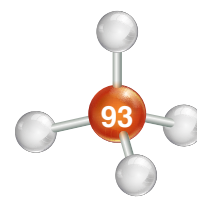


Figura 4.46. Estructura de Lewis de la molécula de pentafluoruro de fósforo.







Existen tres átomos de flúor marcados con una "e" de *ecuatoriales*. Esto significa que dichos átomos se encuentran en los vértices de una base común, es decir, en el mismo plano que el átomo central, mientras que los que están marcados con una "a", representan los átomos de flúor *axiales*, que se encuentran arriba y abajo del plano. Los ángulos de enlace F-P-F son de 90° (desde el flúor axial hasta el ecuatorial), de 120° (desde ecuatorial a ecuatorial) y de 180° (de axial a axial) (Figura 4.47).

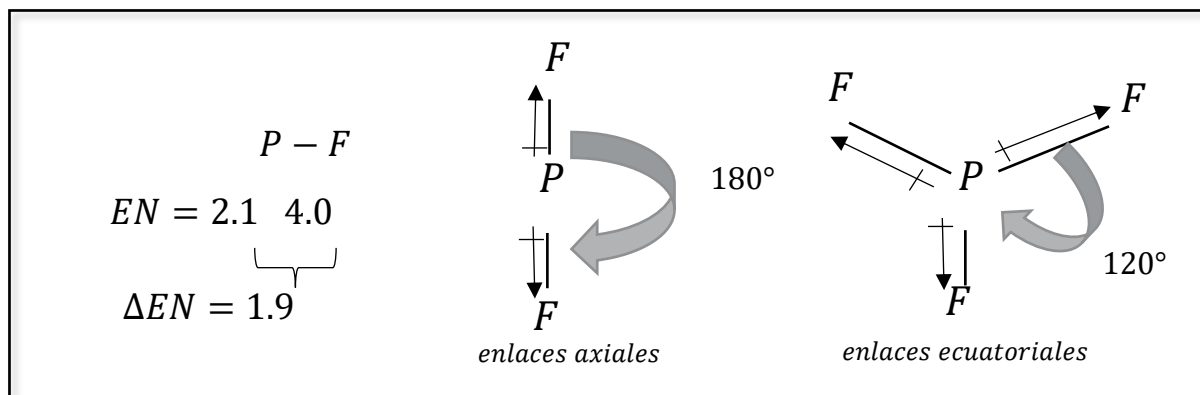


Figura 4.47. Disposición axial y ecuatorial de la molécula de pentafluoruro de fósforo.

Existe una gran diferencia entre la electronegatividad del fósforo y la del flúor, por lo que se intuye que tienen enlaces muy polares. Por ello los dipolos de enlace fueron separados en dos grupos, aunado a que existen dos tipos de enlace P-F diferentes: los ecuatoriales y los axiales. Los dipolos de enlaces axiales se cancelan entre sí, lo mismo que los dipolos de enlaces ecuatoriales. Por tanto, las moléculas de PF<sub>5</sub> son no polares.

Al referirse a las otras cuatro vertientes, se advierte la conveniencia de considerar que poseen al menos un par de electrones libres, también llamados pares de electrones no compartidos o no enlazantes, los cuales ocupan más espacio que los enlazantes. Esto provoca un aumento en la repulsión de los pares no compartidos. La vertiente tetraedro irregular o sube y baja, posee cuatro pares enlazantes y un par de electrones libres.

Considerando la molécula de SF<sub>4</sub> (Figura 4.48):

El átomo central está representado por el azufre y a su alrededor cuatro átomos de flúor y un par de electrones libres. Es un ejemplo típico para el tetraedro irregular. El azufre posee cinco grupos de electrones, por lo que se intuye que pertenece a la geometría electrónica bipiramidal trigonal, y que, por esta misma distribución, contiene enlaces axiales y ecuatoriales, pero es crucial establecer si el enlace libre es más estable en una posición axial o en una ecuatorial.

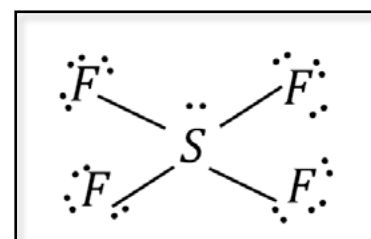


Figura 4.48. Estructura de Lewis de la molécula SF<sub>4</sub>.

Si el enlace libre estuviera en una posición axial, estaría a 90° de los otros tres pares enlazantes más cercanos, los cuales ocupan posiciones ecuatoriales, y a 180° del siguiente par axial. Por otro lado, si ocupara una posición ecuatorial, dos pares axiales estarían a 90° y los siguientes dos pares ecuatoriales estarían a 120°. Así, el par no enlazado estaría mejor distribuido en una posición ecuatorial (Figura 4.49).

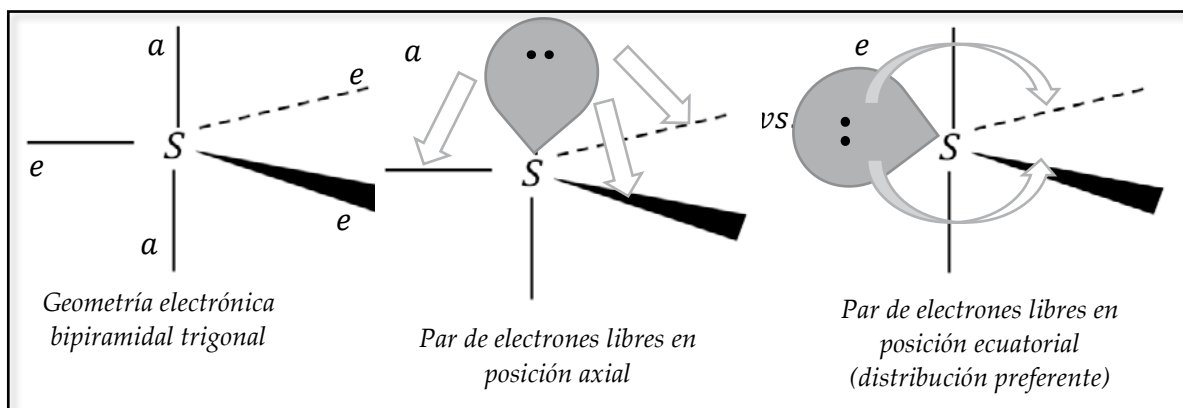


Figura 4.49. Representación de la distribución de los pares de electrones en posición axial y ecuatorial.

De esta forma, los átomos de flúor ocuparán las posiciones restantes. En el caso de la distribución tetraedro irregular, se propone imaginar a la distribución girando de manera que la línea que une a las posiciones axiales represente una tabla sobre la que dos personas se sientan y balancean en un “*sube y baja*” (Figura 4.50), al mismo tiempo que las posiciones ecuatoriales representan el pivote de balanceo.

Los ángulos de enlace pueden variar con respecto a los valores idealizados. En el caso de  $\text{SF}_4$ , la repulsión que interviene es la de par no enlazado-par enlazado (PNE-PE), la cual causa distorsión tanto en los enlaces axiales como en los ecuatoriales S-F y ésta, a su vez, genera una variación de los ángulos de enlace.

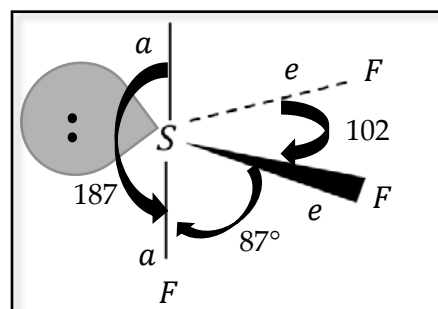


Figura 4.50. Tetraedro irregular o de *sube y baja* más favorable.

#### 4.6.3.5 Geometría molecular octaédrica

La notación de esta geometría es de la forma  $\text{AX}_6$  (A: átomo central, X: átomos periféricos), es decir, consta de un átomo central más seis átomos de otro elemento. Existen cuatro vertientes, aunque, generalmente, los ángulos de enlace son de  $180^\circ$  y  $90^\circ$ . La primera posee los seis pares de electrones enlazados, formando así la geometría molecular **octaédrica** ( $\text{AX}_6$ ) (Figura 4.51A); la segunda, tercera y cuarta tienen al menos un par de electrones no enlazantes. La segunda, posee cinco pares enlazantes y un par no compartido, lo que genera la geometría **piramidal cuadrada** ( $\text{AX}_5$ ) (Figura 4.51B); la tercera vertiente tiene cuatro pares enlazantes y dos pares no enlazantes, obteniendo así la geometría **plana cuadrada** ( $\text{AX}_4$ ) (Figura 4.51C), por último, la cuarta, posee dos pares enlazantes y tres pares libres, generando, así, la geometría **lineal** ( $\text{AX}_2$ ) (Figura 4.51D).

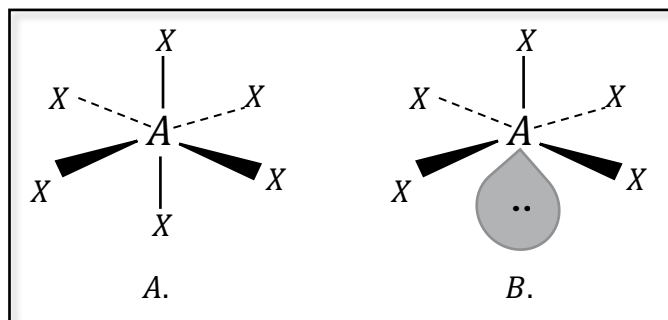


Figura 4.51A. Octaédrica

Figura 4.51B. Piramidal cuadrada

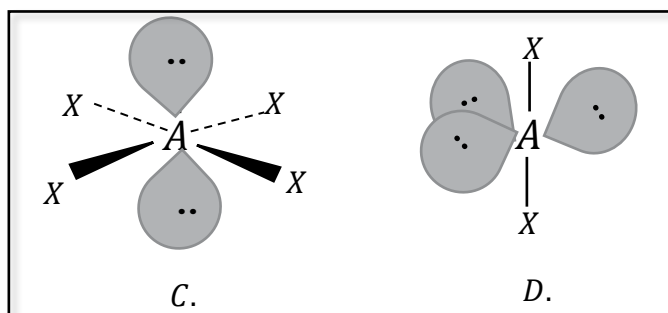


Figura 4.51C. Plana cuadrada

Figura 4.51D. Lineal

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22



El siguiente ejemplo corresponde al hexafluoruro de azufre SF<sub>6</sub> (Figura 4.52):

Se trata de una molécula con seis átomos de flúor alrededor de un átomo central de azufre, cuya disposición, según la TRPECV, se genera al alcanzar la máxima separación en el momento en el que los seis pares de electrones que se encuentran alrededor del átomo central ocupan los vértices de un octaedro regular, mientras que el azufre se coloca en la parte central del mismo.

Los ángulos de enlace F-S-F son de 90° y 180°. Simultáneamente, cada enlace S-F es muy polar; sin embargo, los dipolos de enlace se cancelan debido a la presencia de un dipolo igual a 180°; es decir: los dipolos de enlace grandes se cancelan, lo que provoca que la molécula de SF<sub>6</sub> sea no polar.

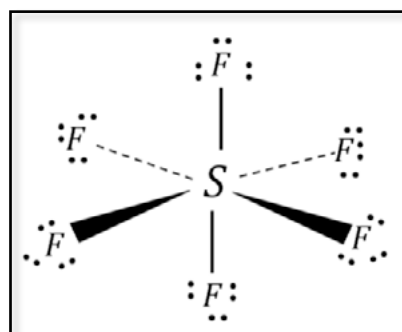


Figura 4.52. Estructura de Lewis de la molécula de hexafluoruro de azufre.

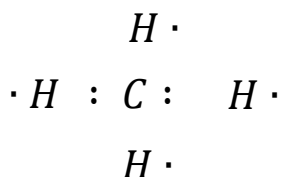
Cabe destacar que la geometría octaédrica posee una gran simetría: las seis posiciones son equivalentes, por tanto, no importa en qué posición coloquemos al primer par de electrones libres, cuando se trata de la pirámide cuadrada. En la geometría cuadrada plana, para generar la mayor estabilidad en la distribución, se busca que los dos pares no compartidos estén a 180° entre sí.

En el apéndice A se encuentra una tabla que contiene un resumen de todas las geometrías electrónicas y moleculares.

### PROBLEMA TIPO

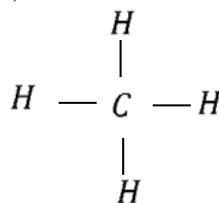
Durante la diagénesis, que es la primera etapa de transformación de la materia orgánica generada mediante un proceso de descomposición y ataques bacterianos, se produce metano CH<sub>4</sub> biogénico o biológico y corresponde con el gas seco, esto bajo las condiciones de temperatura 0° a 50°C y presión hasta 300 bares. Con ayuda de la TRPECV, prediga el tipo de geometría molecular que le corresponde al metano.

*Solución:* En primer lugar, se observa que el carbono es tetravalente, es decir, tiende a unirse mediante cuatro enlaces covalentes, los cuales son ocupados por las cuatro moléculas de hidrógeno, veamos su estructura de Lewis:



Debido a que el carbono posee cuatro electrones de valencia, requiere cuatro más para cumplir con la regla del octeto y generar estabilidad, mismos que le proporciona el hidrógeno.

Mediante la TRPECV, se puede predecir la distribución de los cuatro electrones de valencia hacia los vértices de un tetraedro regular, debido a que, de esta forma, se logra la mayor separación entre los cuatro pares de electrones alrededor del átomo central, es decir, mediante la TRPECV, se puede predecir la geometría electrónica tetraédrica, sin electrones libres.



Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

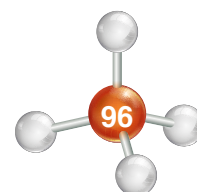
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

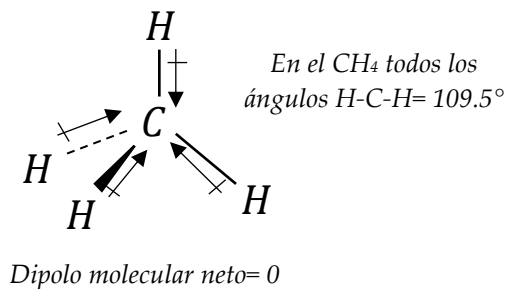
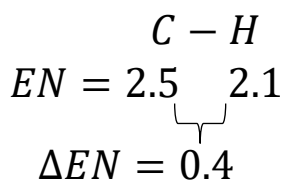
Cap. 21

Cap. 22





Los dipolos de enlace individuales son muy poco polares y, como se observa, están dirigidos hacia el carbono, por último, debido a su simetría los dipolos de enlace se cancelan y, por lo tanto, la molécula de  $\text{CH}_4$  no es polar.



Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

## 4.7 Fases: sólida, líquida y gaseosa. Fenómenos de superficie: tensión superficial, capilaridad

El  $\text{H}_2\text{O}$  es una de las sustancias más interesantes en la naturaleza debido a sus propiedades y características, sobre todo porque puede aparecer en las tres fases de la materia: el hielo es sólido, rígido y con forma definida; el vapor de agua es gaseoso, compresible, pero a la vez expandible, y el agua líquida que puede fluir y adoptar la forma del recipiente que lo contenga.

Sin embargo, no todas las sustancias pueden comportarse de esta manera: en algunos casos requieren de manipulaciones artificiales para obtener la fase deseada. En el transcurso del tiempo, el hombre ha entendido los procesos y creado los procedimientos necesarios para “moldear” a las sustancias según sus necesidades, de este modo ha inventado artefactos que licúan el aire, frigoríficos que solidifican el agua y calderas que vaporizan.

### 4.7.1 Fase sólida

En su fase sólida las sustancias se caracterizan por tener una forma y volumen constantes y ser rígidas o duras. A menudo, sus átomos se entrelazan de tal forma que le confieren cierta resistencia a la deformación. Poseen, además, una fluidez muy baja o nula.

En los sistemas cristalinos, por ejemplo, dichas propiedades se explican a partir de la forma como sus partículas se posicionan, ordenadamente, en lugares fijos en el espacio. Así dan lugar a redes cristalinas que pueden observarse de manera macroscópica. En un mineral de piritita  $\text{FeS}_2$  (Figura 4.53), por ejemplo, la disposición cúbica de sus caras es un reflejo del ordenamiento de sus partículas y, por lo tanto, de su red cristalina.

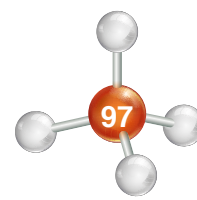


Figura 4.53. Piritita cúbica, tomada de la colección mineralógica de la Facultad de Ingeniería

A pesar de que las partículas ocupan lugares fijos en el espacio no se encuentran inmóviles; al contrario, se mantienen vibrando de manera que son susceptibles a los cambios de temperatura, por ejemplo, si ésta aumenta se incrementa la oscilación de las partículas, por lo que se acrecienta la separación entre ellas y el sólido aumenta su volumen. Este fenómeno es conocido como *dilatación*.

### 4.7.2 Fase líquida

Las características más destacables de esta fase son la capacidad de fluir y la capacidad que tienen las sustancias para adoptar la forma del recipiente que las contiene. Las partículas que componen





a un líquido pueden moverse libremente, debido a su energía cinética, aunque ésta no es lo suficientemente grande como para vencer la fuerza de atracción que existe entre las partículas. Por ello se mantienen relativamente juntas. Si tomamos un vaso de vidrio y se llena con agua (Figura 4.54), se observa que el líquido en cuestión adoptará la forma del recipiente, y que fluye con facilidad.



Figura 4.54. Vaso de vidrio con agua.

### 4.7.3 Fase gaseosa

En esta fase, las fuerzas que mantienen unidas a las partículas son muy pequeñas, así como el número de las mismas por unidad de volumen. Estas partículas se mueven de forma desordenada, chocando unas contra otras, y contra el recipiente que las contiene. Así se explica que los gases no posean una forma definida, que sean capaces de expandirse indefinidamente o a lo largo del recipiente que los contiene y que posan alta compresibilidad. La Tabla 4.4 resume las características principales de las tres fases de la materia.

Sólido	Líquido	Gaseoso
Volumen fijo	Volumen fijo	No tienen volumen fijo, pero adquieren el volumen del recipiente que los contiene
Forma definida	Adopta la forma del recipiente que los contiene	No tiene forma definida
Las partículas que lo componen se encuentran cercanas entre sí	Las partículas que lo componen se encuentran relativamente cercanas entre sí	Las partículas se encuentran muy separadas entre sí
Poseen partículas ordenadas en lugares fijos en el espacio, generando redes cristalinas	Poseen partículas que pueden trasladarse libremente pero aún conservan interacciones unas con otras	Tienen total libertad de movimiento, se mueven desordenadamente y tienden a chocar entre ellas y con las paredes del recipiente que las contiene
No se comprimen	No se comprimen significativamente	Gran compresibilidad
No se expanden naturalmente, debe haber un cambio de temperatura	No se expanden naturalmente, debe haber un cambio de temperatura	Se expanden mucho naturalmente.

Tabla 4.4. Características principales de las tres fases de la materia.

### 4.7.4 Teoría cinético-molecular

El comportamiento de la materia se puede explicar mediante la *teoría cinético-molecular* la cual se basa en las siguientes proposiciones:

- La materia está compuesta por partículas muy pequeñas en continuo movimiento, entre los que hay espacios vacíos. Las partículas pueden ser átomos, moléculas, iones...
- La energía cinética de las partículas aumentará al incrementar la temperatura.
- Las partículas pueden moverse en cualquier dirección. En el caso de los gases éstas chocarán continuamente entre sí y con las paredes del recipiente que las contiene. Los choques están relacionados con la presión: entre más choques, más presión.
- El estado de agregación de la materia puede ser modificado al cambiar la energía cinética de sus partículas.
- La teoría cinético-molecular trata de explicar los cambios de una fase a otra: la fusión, evaporación, sublimación, condensación y solidificación.

#### 4.7.4.1 Fusión

Se le llama *fusión* al proceso físico mediante el cual un sólido pasa a la fase líquida. Esto ocurre al incrementar la temperatura del sólido en cuestión, debido a que las partículas que lo constituyen aumentan su energía cinética, registrando una separación cada vez más evidente. Dicha





separación logrará, en un momento determinado, debilitar las fuerzas que mantienen unidas a las moléculas, generando la desaparición de su red cristalina, hasta completar la formación del líquido.

Se le llama *calor latente de fusión* ( $L_f$ ) al calor necesario para que un gramo de sólido pase a la fase líquida. Se mide en J/kg.

#### 4.7.4.2. Evaporación

Este cambio físico sucede cuando un líquido pasa a la fase gaseosa, debido a que adquiere suficiente energía cinética como para dispersarse. Se puede producir en la superficie del líquido (*evaporación*), o en el interior del líquido (*ebullición*).

La evaporación es un fenómeno superficial, es decir, sólo las partículas que se encuentran en la superficie del líquido son las que adquieren la energía cinética necesaria para dispersarse. La velocidad de evaporación depende de la temperatura: a mayor temperatura mayor velocidad de evaporación.

La energía necesaria para que un gramo de líquido pase a la fase gaseosa se denomina *calor latente de vaporización* ( $L_v$ ).

#### 4.7.4.3. Sublimación

No es necesario que una sustancia sólida pase a la fase líquida para, consecuentemente, transformarse en un gas, ya que las partículas de la superficie de un sólido pueden adquirir la energía cinética necesaria para romper las fuerzas que las mantienen unidas y pasar así, a la fase gaseosa. Este proceso es conocido como *sublimación*.

La energía necesaria para que un gramo de sólido pase a la fase gaseosa se llama *energía de sublimación* y coincide con la suma de los calores latentes de fusión ( $L_f$ ) y de vaporización ( $L_v$ ).

Del mismo modo, cuando un gas se enfría puede pasar directamente a la fase sólida, este proceso se conoce como *sublimación inversa*, *sublimación regresiva* o *deposición*.

#### 4.7.4.4. Condensación

Se conoce así al cambio físico mediante el cual se pasa de la fase gaseosa a la fase líquida. Si es vapor el que cambia a la fase líquida se llama *condensación*. Por ejemplo, las nubes al precipitarse en forma de lluvia. Por otro lado, si es un gas el que pasa a la fase líquida se le denomina *licuefacción*, por ejemplo, cuando el oxígeno es convertido en líquido con fines medicinales.

#### 4.7.4.5 Solidificación

Llamamos así al cambio físico que sucede cuando un líquido pasa a la fase sólida. Un claro ejemplo es cuando colocamos agua en un refrigerador y se congela, o cuando se elabora una vela con cera. La Figura 4.55 es un resumen de todos los cambios de fases.

### 4.7.5 Fenómenos de superficie: tensión superficial y capilaridad

Los líquidos poseen un volumen fijo; sin embargo, su forma puede variar. El área de la superficie que los envuelve tiende a cambiar: se adaptan a la forma del recipiente que los contiene, aunque también pueden adoptar

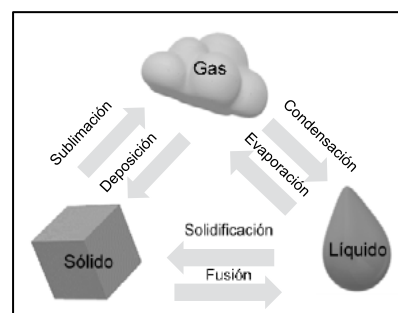
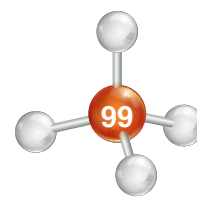


Figura 4.55. Representación de los cambios de fase.





formas específicas. Por ejemplo: gotas o burbujas, siempre dejando una superficie libre, la cual no necesariamente tiene que ser plana y no está determinada por la forma del recipiente.

Las fuerzas superficiales como la *cohesión* (líquido-líquido), que se define como la atracción que existe entre las moléculas la cual mantiene unidas a las partículas de una sustancia y la *adhesión* (líquido-sólido), definida como la interacción entre las superficies de distintos cuerpos, son las responsables de distintos fenómenos de suma importancia como la *tensión superficial* y la *capilaridad*.

#### 4.7.5.1 Tensión superficial

La superficie de un líquido suele comportarse como una membrana de tensión. Se puede decir que las moléculas de un líquido, dispuestas de manera considerable por debajo de esta superficie, actúan una sobre otra mediante fuerzas iguales en todas direcciones. Por otro lado, las moléculas cercanas a la superficie generan mayor atracción entre sí en comparación con las que se encuentran debajo de ellas, debido a las fuerzas de van der Waals, las cuales provocan que la superficie se comporte como una película o membrana con resistencia a la deformación. Esta mejora entre las fuerzas de atracción intermoleculares en la superficie se le conoce como *tensión superficial*, y ésta depende de la naturaleza del líquido, del medio que le rodea y de la temperatura.

La tensión superficial  $\gamma$  se define matemáticamente como la fuerza de tensión por unidad de longitud:

$$\gamma = \frac{F}{2L}$$

*El factor dos se considera debido a que existen dos superficies.*

Ea Tabla 4.5 se presentan algunos valores de  $\gamma$  experimentales.

Líquido en contacto con el aire	Temperatura (°C)	Tensión superficial (mN/m)
Benceno	20	28.9
Tetracloruro de carbono	20	26.8
Etanol	20	22.3
Glicerina	20	63.1
Mercurio	20	465.0
Aceite de oliva	20	32.0
Disolución de jabón	20	25.0
Agua	0	75.6
Agua	20	72.8
Agua	60	66.2
Agua	100	58.9
Oxígeno	-193	15.7
Neón	-247	5.15
Helio	-269	0.12

Tabla 4.5. Valores experimentales de tensión superficial para diferentes líquidos.

#### 4.7.5.2 Capilaridad

Se define como *capilaridad* a la elevación o depresión de un líquido en un tubo estrecho, causado por la tensión superficial de un líquido.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

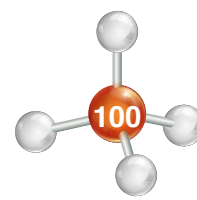
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





Como se vio anteriormente, las fuerzas de adhesión son generadas por la interacción entre las superficies de distintos cuerpos. Dependiendo de la predominancia de las fuerzas adhesivas o cohesivas se producirá un comportamiento distinto entre la superficie libre del líquido y las paredes del recipiente: puede curvarse hacia arriba o hacia abajo formando un menisco.

El ángulo de contacto entre la superficie líquida y la superficie sólida se conoce como  $\theta$  y dependiendo de él pueden ocurrir tres fenómenos: que el líquido ascienda o moje (siempre y cuando  $\theta < 90^\circ$ ), se mantenga ( $\theta = 90^\circ$ ) o descienda o no moje (cuando  $\theta > 90^\circ$ ) a través de un tubo estrecho, conocido también como capilar, una altura  $h$  determinada (Figura 4.56). A este fenómeno se le conoce como *capilaridad* o *acción capilar*.

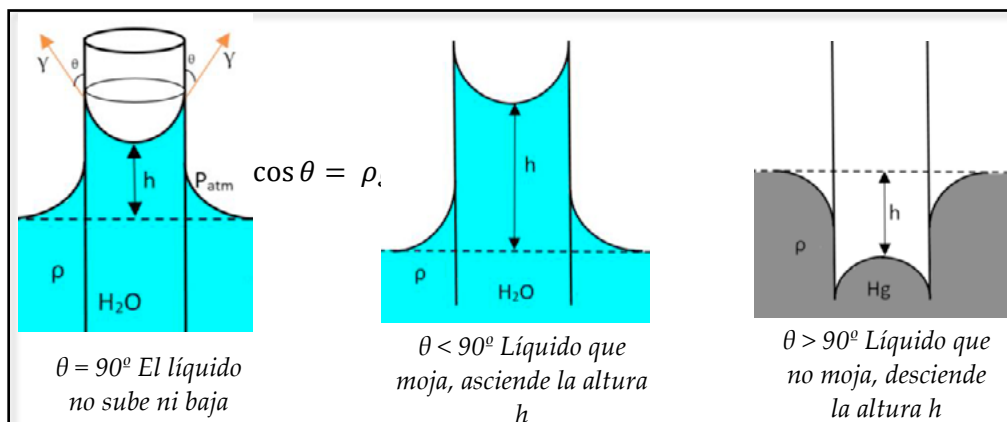


Figura 4.56. Formas en las que se puede representar la capilaridad.

Cabe destacar que cuando el ángulo de contacto se encuentra en equilibrio, el peso de la columna de líquido estará compensada por la componente vertical de las fuerzas de cohesión, ya que las fuerzas de adhesión no intervienen y se pueden representar de la siguiente manera:

### PROBLEMA TIPO

El benceno es un tipo de hidrocarburo aromático que posee un coeficiente de tensión superficial de 28.9 mN/m. Calcule la fuerza de tensión que se genera dentro de 0.25 m de longitud.

Solución:

$$\gamma = \frac{F}{2L} \rightarrow F = \gamma \cdot 2L$$

$$F = 28.9[\text{mN/m}] \cdot 2(0.25[\text{m}])$$

$$F = 14.45 [\text{mN}]$$

## 4.8 Disoluciones: diluidas, saturadas y sobresaturadas. Disoluciones verdaderas. Suspensiones y coloides

### 4.8.1 Dispersiones

En una mezcla homogénea, existe, por lo general, una sustancia que se presenta en mayor cantidad y otra en menor proporción, dispersa en la primera. Así, se habla de una *fase dispersora* y una *fase dispersa*. Es usual clasificar las dispersiones en *disoluciones*, *coloides* y *suspensiones*, en función del tamaño de las partículas de la fase dispersa.



### 4.8.2 Disoluciones

Una **disolución** es definida como una mezcla homogénea, a nivel molecular, de dos o más sustancias, en la cual no ocurre separación de fases. Se encuentra en función de un disolvente y uno o más solutos, cuyas proporciones pueden variar de una disolución a otra. El disolvente es el medio en el cual se disuelven los solutos. Éstos suelen disolverse para dar iones o moléculas en disolución. Una sustancia pura tiene composición fija.

Las disoluciones incluyen diferentes combinaciones en las que un sólido, un líquido o un gas actúan ya sea como disolvente o como soluto (Tabla 4.6). Por lo general, el disolvente es líquido. Por ejemplo, el agua de mar es una disolución acuosa de muchas sales y algunos gases como dióxido de carbono y oxígeno. Es común que el disolvente sea la especie más abundante.

Fase	Fase original del soluto	Ejemplo
gaseosa	gaseosa	aire
	líquida	aire húmedo
	sólida	algunos humosfinos
líquida	gaseosa	agua gasificada
	líquida	vinagre
	sólida	agua de mar
sólida	gaseosa	hidrógeno adsorbido en materiales
	líquida	amalgama de mercurio
	sólida	aleaciones

Tabla 4.6 Ejemplos de algunas disoluciones.

### 4.8.3 Proceso de disolución

#### 4.8.3.1 Espontaneidad del proceso de disolución

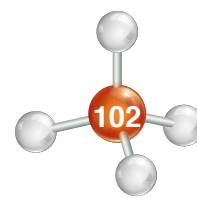
La facilidad o dificultad con la que se disuelve un soluto depende de dos factores que acompañan al proceso: 1) el cambio de energía y 2) el cambio de desorden (**cambio de entropía**). Un proceso es favorecido por a) una disminución de la energía del sistema que corresponde a un proceso exotérmico y b) un incremento de la entropía o aleatoriedad del sistema.

El cambio de energía que acompaña al proceso de disolución recibe el nombre de **calor de disolución**,  $\Delta H_{disolución}$  (entalpía), la cual, fundamentalmente, indica la intensidad con la que interactúan las partículas del soluto y del disolvente. Si una disolución se calienta conforme se va disolviendo una sustancia, se desprende energía en forma de calor. Un valor negativo de calor de disolución indica desprendimiento de calor, y el proceso se denomina **exotérmico**. En el caso de una **reacción endotérmica** el calor de disolución es positivo, lo cual indica que se absorbe calor en la interacción soluto-disolvente. Por esta razón es necesario suministrar constantemente energía del entorno para que la reacción progrese. Cuanto más negativos sean los valores de calor de disolución, tanto más favorecen el proceso de disolución.

En un líquido puro todas las fuerzas intermoleculares ocurren entre moléculas semejantes. Cuando se mezclan un líquido y un soluto, cada molécula interactúa, entonces, con moléculas diferentes, así como con moléculas iguales. La fuerza relativa de estas interacciones permite determinar el grado de solubilidad de un soluto en un disolvente. Las interacciones más importantes que influyen en la disolución de un soluto en un disolvente son:

- Las atracciones débiles soluto-soluto favorecen la solubilidad.
- Las atracciones débiles disolvente-disolvente favorecen la solubilidad.
- Las atracciones fuertes soluto-disolvente favorecen la solubilidad.

En la Figura 4.57 se puede observar el proceso de la disolución desde un punto de vista energético. En la **Etapa A** se superan las atracciones intermoleculares entre las partículas del soluto puro para





que se disuelva, en un proceso endotérmico; es decir, que absorbe energía. En la **Etapa B** se separan las moléculas del disolvente unas de otras para “hacer espacio” para las partículas de soluto en un proceso endotérmico. Sin embargo, en la **Etapa C** se desprende energía (exotérmica) a medida que las partículas de soluto y las moléculas de solvente interactúan en la solución.

No obstante, muchos sólidos se disuelven en líquidos mediante procesos endotérmicos. La razón por la que pueden ocurrir estos procesos es que hay un gran incremento de desorden del soluto durante el proceso de disolución. Las partículas del soluto están muy ordenadas en un cristal sólido, pero tienen libertad para moverse de forma aleatoria en soluciones líquidas. De igual manera, el grado de desorden del disolvente aumenta conforme se va formando la disolución, debido a que, entonces, las moléculas del disolvente se encuentran en un medio más aleatorio. Éstas están rodeadas por una mezcla de partículas del soluto y del disolvente. Los gases que no reaccionan unos con otros siempre podrán mezclarse en cualquier proporción, debido a que el incremento de desorden que acompaña al mezclado siempre es más importante que los posibles cambios en las atracciones intermoleculares.

Casi todos los procesos de disolución están acompañados por un incremento global del desorden. Por lo tanto, el factor de desorden suele ser favorable para la solubilidad y factor determinante que permite la disolución o, si no lo hace, puede suceder que sea lo suficientemente pequeño como para ser superado por los efectos del aumento de desorden.

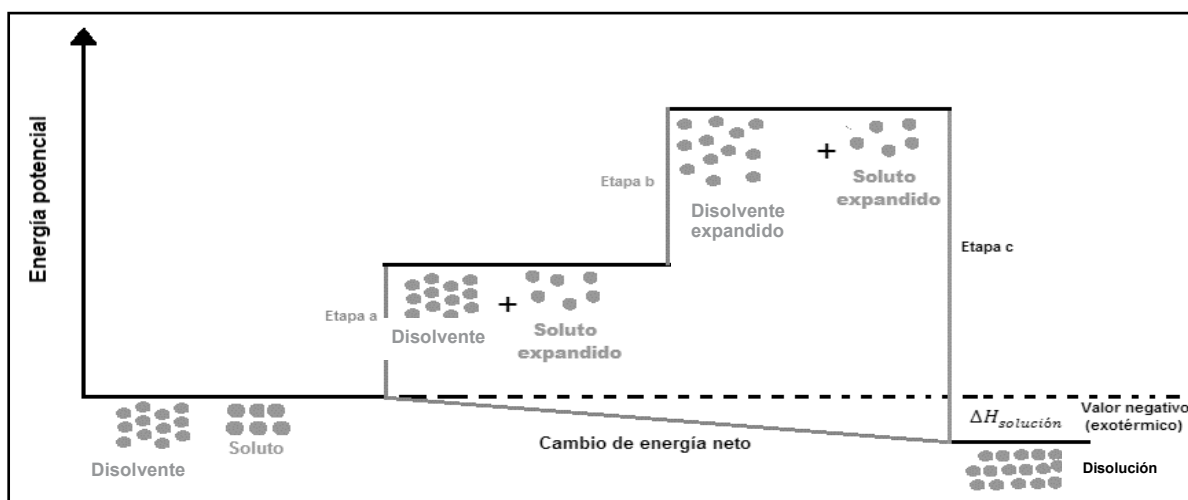


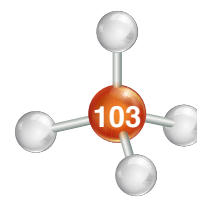
Figura 4.57. Esquema del proceso de disolución, dividido en etapas según los cambios de energía que presentan los componentes de disolución.

### 4.8.3.2 Disolución de sólidos en líquidos

La capacidad de un sólido para disolverse depende, en gran medida, de su energía de la red cristalina. Esto es de la fuerza de las atracciones entre las partículas que conforman el sólido. La **energía de la red cristalina** se define como el cambio de energía que acompaña a la formación de un mol en estado cristalino a partir de sus partículas componentes en estado gaseoso.

La cantidad de energía que abarca este proceso depende de la atracción electrostática entre los iones en el sólido. Cuando estas atracciones son intensas, debido a las altas cargas o a los tamaños de iones pequeños, se desprende una gran cantidad de energía conforme se forma el sólido y, por tanto, aumenta su estabilidad.

El proceso inverso de la reacción de formación de cristales es la separación del cristal en iones separados en fase gaseosa.







Este proceso puede considerarse como la primera etapa hipotética de formación de una solución de un sólido en un líquido. Es siempre endotérmico. Cuanto más pequeña sea la magnitud de la energía de la red cristalina, más rápida será la disolución porque debe suministrarse menos energía para iniciar el proceso.

Si el disolvente es agua, la energía que debe suministrarse para expandirla es necesaria para romper algunos de los puentes de hidrogeno entre las moléculas de agua.

El tercer factor que contribuye al calor de disolución es el grado en el que las moléculas del disolvente interactúan con las partículas del sólido. El proceso mediante el cual las moléculas del disolvente rodean e interactúan con los iones o moléculas del soluto recibe el nombre de *solvatación*. Cuando el disolvente es agua, el término más adecuado es *hidratación*.

Si se calcula el calor global de disolución ( $\Delta H_{\text{disolución}}$ ) de un sólido que se disuelve en un líquido, el resultado es igual al calor de solvatación menos la energía de red cristalina

$$\Delta H_{\text{disolución}} = (\text{calor de solvatación}) - (\text{energía de la red cristalina})$$

Los solventes polares disuelven a los solutos iónicos y moleculares de tipo polar y los disolventes no polares disuelven a los solutos moleculares de tipo no polar.

#### 4.8.3.3 Disolución de líquidos en líquidos (miscibilidad)

El termino *miscibilidad* es empleado para describir la capacidad de un líquido para disolverse en otro. Como se hizo en el caso de las disoluciones sólido-líquido, los tres tipos de interacciones de atracción deben considerarse para las disoluciones líquido-líquido. Puesto que la atracción soluto-soluto suele ser mucho más débil en los solutos líquidos que en los solutos sólidos, este factor es menos importante y, por esta razón, el proceso de mezclado suele ser exotérmico en líquidos miscibles. Los líquidos polares tienden a interactuar profusamente y se disuelven con facilidad en otros líquidos polares.

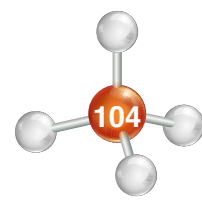
Los líquidos no polares que no reaccionan con el disolvente no son muy solubles, generalmente, en líquidos polares, debido a la ausencia de fuerzas de interacción. Se dice que son inmiscibles. Sin embargo, los líquidos no polares suelen ser muy solubles (miscibles) en otros líquidos no polares. Entre moléculas no polares sólo existen fuerzas de dispersión, las cuales son débiles y se superan con facilidad.

#### 4.8.3.4 Disolución de gases en líquidos

Es de esperarse que los gases polares sean más solubles en disolventes polares y que los gases no polares sean más solubles en líquidos no polares.

#### 4.8.3.5 Velocidad de disolución

A una temperatura dada, la velocidad de la disolución de un sólido aumenta si los cristales grandes se muelen hasta pulverizarlos. Esta acción incrementa el área de superficie, con lo cual, aumenta el número de iones o moléculas de soluto en contacto con el disolvente. Cuando un sólido se coloca en agua, parte de sus partículas se solvatan y se disuelven. La velocidad de este proceso disminuye conforme pasa el tiempo debido a que el área de superficie de los cristales se va haciendo cada vez menor. Al mismo tiempo, aumenta el número de partículas de soluto en la disolución, de modo que chocan con más frecuencia contra el sólido y algunas de estas colisiones producen recristalización. La velocidad de los dos procesos opuestos se iguala después de cierto tiempo.





#### 4.8.3.6 Disoluciones diluidas

Este evento ocurre cuando la cantidad de soluto es pequeña, respecto del disolvente. Por ejemplo: una solución de 1 gramo de sal de mesa en 100 litros de agua

#### 4.8.3.7 Disoluciones saturadas y solubilidad

En la medida que un soluto sólido comienza a disolverse, la concentración de partículas del soluto en la disolución aumenta. Lo mismo sucede con la probabilidad de que choquen con la superficie del sólido. Tal choque podría hacer que la partícula quedara otra vez unida al sólido. Este proceso, que es opuesto al proceso de disolución, se denomina *crystalización*. Por tanto, en una disolución que está en contacto con soluto no disuelto se dan dos procesos opuestos (Figura 4.58).

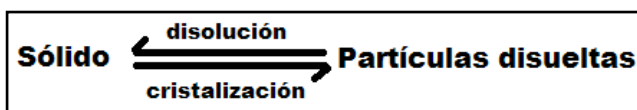


Figura 4.58. Disolución y *crystalización*.

Una disolución que está en equilibrio con un soluto no disuelto está *saturada*. No se disolverá el soluto adicional si se agrega a una disolución saturada. La cantidad de soluto necesaria para formar una disolución saturada en una cantidad dada de disolvente se conoce como *solubilidad* de ese soluto.

Si disolvemos menos soluto del necesario para formar una disolución saturada, la disolución está *insaturada* (no saturada) (Figura 4.59).

En condiciones apropiadas, es posible formar disoluciones que contienen una cantidad de soluto mayor que la necesaria para formar una disolución saturada. Decimos que tales disoluciones están sobresaturadas, pues que las moléculas de soluto de una disolución sobresaturada están presentes en una concentración mayor que su concentración de equilibrio. Tales disoluciones son inestables.

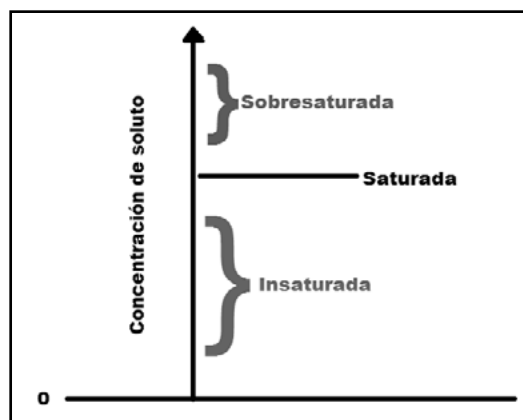


Figura 4.59. Una solución que contiene una cantidad de soluto mayor a la que normalmente tiene en la saturación está *sobresaturada*. Una solución que contiene una cantidad de soluto menor a la que se requiere para alcanzar la saturación está *insaturada*.

#### 4.8.3.8 Efecto de la temperatura en la solubilidad

Muchos sólidos iónicos se disuelven en procesos endotérmicos. Su solubilidad en agua suele aumentar conforme se suministra calor y aumenta la temperatura. La elevación de la temperatura causa un estrés en el equilibrio de solubilidad. Este estrés favorece el proceso en el cual se absorbe calor.

#### 4.8.3.9 Efecto de la presión en la solubilidad

Un cambio de presión no influye perceptiblemente en la solubilidad de sólidos o líquidos en líquidos; sin embargo, la solubilidad de los gases en todos los solventes aumenta a medida que se incrementa la presión parcial de los gases.

La ley de Henry se aplica a gases que no reaccionan con el solvente en que se disuelven. Enuncia que: "A cualquier temperatura dada, la concentración o solubilidad de un gas en un líquido es directamente proporcional a la presión parcial del gas sobre la solución".

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

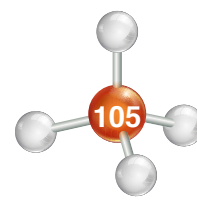
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





$$C_{gas} = kP_{gas}$$

### 4.8.3.10 Disoluciones verdaderas

Las *disoluciones verdaderas* son claras y transparentes y no es posible distinguir ni macroscópica ni microscópicamente sus partículas disueltas de la fase dispersante.

Una sustancia está en una disolución verdadera si la misma está disuelta en iones individuales o moléculas cuyo tamaño es menor que 0,001 micrones, un tamaño de partícula que tiende a no precipitar fuera de la disolución porque la fuerza de la gravedad es insignificante. Las partículas están separadas unas de otras y cada una se mueve en forma más o menos independiente en el solvente. Todas las moléculas en una solución verdadera están en un constante movimiento al azar.

### 4.8.4 Coloides

Un *coloide* es una dispersión de partículas de una sustancia (la fase dispersa) entre un medio dispersor, formado por otra sustancia. Cuando las partículas de una mezcla homogénea tienen aproximadamente un tamaño de 10 a 10,000 veces mayor que los átomos y moléculas, si tiene un sistema coloidal. En lugar de hablar de disolvente y soluto, se emplean los términos *fase dispersora* y *fase dispersa*. Una suspensión coloidal también carece de la homogeneidad de una disolución común. La fase dispersora y el medio dispersor pueden ser gases, líquidos, sólidos o una combinación de diferentes fases (Tabla 4.7).

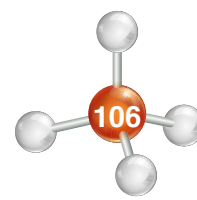
Medio dispersor	Fase dispersora	Nombre comun	Ejemplo
gas	líquido	aerosol líquido	nubes "spray"
	sólido	aerosol sólido	humo
líquido	gas	espuma	merengue, jabonadura
	líquido	emulsión	leche, mayonesa
	sólido	sol	gelatinas, pinturas
sólido	gas	espuma sólida	malvavisco, piedra pómez
	líquido	emulsión sólida	queso, mantequilla
	sólido	sol sólido	perlas

Tabla 4.7 Algunos ejemplos con sus fases dispersoras y medios dispersores.

Una forma de distinguir una disolución de un coloide es mediante el efecto Tyndall. Cuando un rayo de luz pasa a través de un coloide, es dispersado por el medio. Dicha dispersión no se observa con las disoluciones comunes porque las moléculas del soluto son demasiado pequeñas para interactuar con la luz visible.

#### 4.8.4.1 Coloides hidrofílicos e hidrofóbicos

Los coloides más importantes son aquéllos en los que el medio dispersor es agua. Es común referirse a tales coloides como *hidrofílicos* o *hidrofóbicos*. Los coloides hidrofóbicos sólo se pueden preparar en agua si se estabilizan de alguna forma; de lo contrario, su natural falta de afinidad por el agua hace que se separen de ella. Los coloides hidrofóbicos se pueden estabilizar mediante adsorción de iones en su superficie (Figura 4.60). (El término *adsorción* se refiere a la





adherencia a una superficie y no significa lo mismo que *absorción*, que se refiere al paso hacia el interior.) Estos iones adsorbidos pueden interactuar con el agua y así estabilizar el coloide.

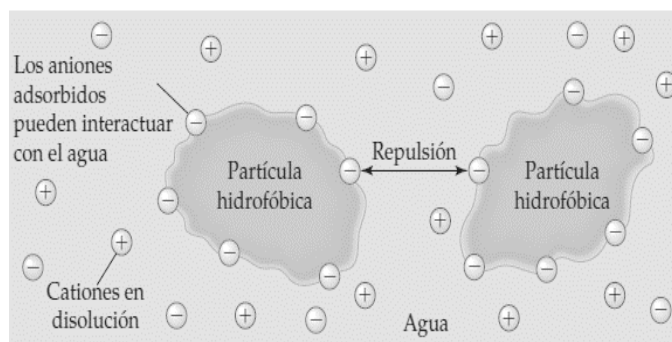


Figura 4.60. Partícula hidrofóbica.

#### 4.8.4.2 Eliminación de partículas coloidales

Dado que las partículas coloidales son muy pequeñas, no se les puede separar por filtración simple. Deben agrandarse mediante un proceso llamado *coagulación*. Las partículas más grandes así obtenidas se pueden separar por filtración o dejando que se asienten para separarse del medio dispersor.

El calentamiento o la adición de un electrólito a la mezcla puede causar la coagulación. Al calentarse la dispersión coloidal, aumenta el movimiento de las partículas y, por ende, el número de choques. La adición de electrólitos causa la neutralización de las cargas superficiales de las partículas y elimina las repulsiones electrostáticas que inhiben su aglomeración

#### 4.8.5 Suspensiones

Si el tamaño promedio de las partículas de la mezcla es mayor que en el caso de los coloides, se habla de suspensiones (Tabla 4.8).

Propiedades	Disolución	Coloide	Suspensión
Tamaño de la partícula	< que 1 nm	10 - 10 000 nm	> que 10 000 nm
Homogeneidad	homogénea	en el límite	heterogénea
Acción de la gravedad	no sedimenta	puede sedimentar	sedimenta
Filtrabilidad	no filtrable	no filtrable	filtrable

Tabla 4.8. Comparación de las propiedades de las disoluciones, los coloides y las suspensiones.

La fuerza de la gravedad domina sobre las interacciones entre partículas, así que las suspensiones acaban por sedimentarse y presentar dos fases en forma de mezcla heterogénea.

### 4.9 Conductividad eléctrica de materiales iónicos en disolución

#### 4.9.1 Conducción eléctrica

La corriente eléctrica representa transferencia de carga, la cual puede ser conducida a través de metales y de electrólitos líquidos puros (esto es, sales fundidas) o en disoluciones que contengan electrólitos. El primer tipo de conducción recibe el nombre de *conducción metálica*, la cual comprende el flujo de electrones sin que los átomos del metal tengan un movimiento semejante y sin cambios evidentes del metal. La *conducción iónica o electrolítica* es la conducción de corriente eléctrica por movimiento de iones a través de una disolución o de un líquido puro. Los iones con carga positiva viajan hacia el electrodo negativo, en tanto que los iones con carga negativa lo hacen hacia el electrodo positivo. Ambos tipos de conducción, iónica y metálica, tienen lugar en las celdas electroquímicas.



En los conductores metálicos, el transporte de la corriente eléctrica tiene lugar debido al movimiento de los electrones del metal bajo la acción de una diferencia de potencial. Por tratarse de un solo tipo de transportador (electrones), puede considerarse al conductor electrónico como homogéneo y para él es válida la ley de Ohm.

$$R = \frac{V}{I}$$

Donde:  $\left\{ \begin{array}{l} R \text{ es la resistencia del conductor (en Ohm, } \Omega) \\ V \text{ es la diferencia de potencial aplicada (en voltios, V)} \\ I \text{ es la intensidad de corriente que circula a través del} \\ \text{conductor (en amperios, A).} \end{array} \right.$

En el caso de las disoluciones electrolíticas, la corriente es transportada por los iones de la disolución. En ausencia de un campo eléctrico, los iones, que constituyen un conductor iónico, se encuentran en un constante movimiento al azar. Este movimiento se debe a la acción de fuerzas térmicas y de convección. Cuando los iones son sometidos a la acción de un campo eléctrico (por la aplicación de una diferencia de potencial) se mueven, en un sentido u otro, de acuerdo con su carga, fenómeno que se conoce como *migración iónica*. En estas condiciones, se puede considerar a la disolución como un conductor electrónico homogéneo que sigue la Ley de Ohm.

#### 4.9.2 Conductividad específica $\kappa$

En el caso de las disoluciones electrolíticas, la corriente es transportada por los iones de la disolución, los cuales se mueven en distintos sentidos (de acuerdo con el signo de su carga) bajo la acción del campo eléctrico producido por la diferencia de potencial aplicada. Aquí, el conductor iónico también puede ser considerado como homogéneo (siempre y cuando no existan fuerzas mecánicas o viscosas aplicadas).

La *conductividad específica* de una disolución se define como la inversa de la resistividad específica ( $\rho$ ) o como la conductancia de un cubo de disolución de electrolito de 1 cm<sup>3</sup> de lado. Es una magnitud aditiva, lo que significa que, en una disolución electrolítica, donde contribuyen tanto el soluto como el disolvente, se puede escribir:

$$\kappa_{\text{disolución}} = \kappa_{\text{soluto}} + \kappa_{\text{disolvente}}$$

La conductividad de una disolución es una medida de la facilidad con la cual la corriente eléctrica fluye a través de la solución. Ésta varía con la temperatura y con la naturaleza y concentración del soluto. El valor de  $\kappa$  no es una cantidad muy útil para comparar la conductividad de diferentes solutos en disoluciones de diferente concentración, debido a que, si una solución de un electrólito tiene mayor concentración que otra, la más concentrada tendrá mayor conductividad por tener más iones. Para establecer una comparación más exacta se necesita una propiedad en la cual se compense la diferencia de concentración en las disoluciones.

En la Figura 4.61, se muestra la variación de la conductividad con la concentración para distintos electrólitos. El comportamiento general es el mismo para todos los electrólitos. Existe un aumento inicial de la conductividad a medida que aumenta la concentración hasta un valor máximo, lo que se explica porque existe un mayor número de iones dispuestos para la conducción. A partir de un determinado valor

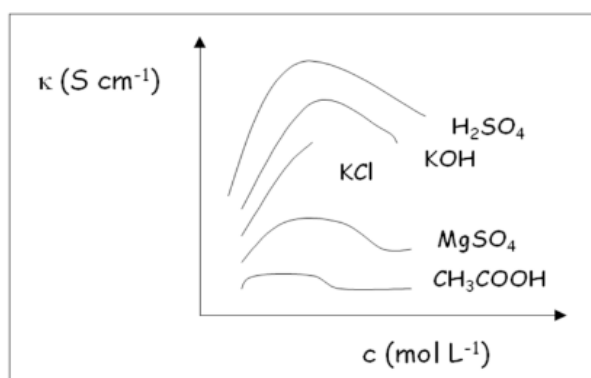


Figura 4.61. Variación de la conductividad con la concentración.





de concentración, la conductividad comienza a disminuir, debido a que las interacciones asociativas entre los iones dificultan la conducción de la corriente.

### 4.9.3 Conductividad molar $\Lambda$

En una disolución iónica la conductividad específica  $\kappa$  medida, depende de la concentración ( $n^\circ$  de iones presentes) y es, definitivamente, la conductancia de  $1\text{cm}^3$  de disolución. Dependerá, por tanto, del número de iones (cationes y aniones), es decir, de la concentración. Por otra parte, también depende de la naturaleza del soluto.

Para normalizar la medida de la conductividad, se introduce la magnitud conductividad molar ( $\Lambda$ ), definida como:  $\Lambda = \frac{\kappa}{c}$ , donde  $c$  es la concentración molar del electrolito añadido.

## 4.10 Aplicaciones en las Ciencias de la Tierra

### 4.10.1 Enlaces químicos en Ciencias de la Tierra

Hay que recordar que un enlace químico resulta de la redistribución de electrones (compartición, ganancia o pérdida), la cual genera una configuración electrónica más estable entre dos o más átomos. Una vez que los electrones se reorganizaron, los átomos permanecerán juntos formando un enlace. Las fuerzas de atracción que unen a los átomos (o iones, o grupos iónicos) en los minerales y generan los enlaces, poseen una naturaleza eléctrica, debido a que tienen cargas positivas y negativas. Es relevante destacar que el tipo de enlace y su intensidad son las características responsables de las principales propiedades físicas y químicas de los minerales. Por ejemplo, la dureza, la exfoliación, la conductividad térmica, eléctrica y la fusibilidad y la compresibilidad son algunas de las propiedades que están directamente relacionadas con las fuerzas de enlace.

Cuanto más fuerte es el enlace, más dureza tendrá el cristal. Por ejemplo, la dureza del diamante (con un 10 en la escala de Mohs, es decir la mayor de todos los minerales), se le atribuye a fuertes fuerzas eléctricas, las cuales mantienen unidos todos los átomos de carbono que lo constituyen (Figura 4.62).

Otros ejemplos son la Galena ( $\text{PbS}$ ) (Figura 4.63) y la Halita ( $\text{NaCl}$ ) (Figura 4.64), minerales que presentan la misma disposición estructural en sus átomos (cúbica), aunque la Galena se funde a  $1113^\circ\text{C}$ , mientras que la Halita lo hace a  $801^\circ\text{C}$ , esto indica que el primer compuesto presenta enlaces más fuertes que el segundo, puesto que se necesita mayor energía calorífica para fundirlo (separar sus átomos), que la energía necesaria para fundir a la Halita.



Figura 4.62. Diamante, el mineral con mayor dureza. Modificada de [www. mundo-mineral.blogspot.mx](http://www.mundo-mineral.blogspot.mx)



Figura 4.63. Ejemplo de Galena, tomada de la colección de minerales de la Facultad de Ingeniería.



Figura 4.64. Ejemplo de Halita, tomada de la colección de minerales de la Facultad de Ingeniería.



## 4.10.2 Fuerzas intermoleculares en Ciencias de la Tierra

Existe un mecanismo de enlace generado por fuerzas electrostáticas relativamente débiles, las cuales se deben a una distribución asimétrica en sus cargas. Nos referimos a las *fuerzas intermoleculares* y más específicamente a las fuerzas de *van der Waals*, las cuales se observan ampliamente en las Ciencias de la Tierra. Estos mecanismos de enlace no dependen de la transferencia de electrones de valencia de un átomo a otro o de la compartición de los mismos.

### 4.10.2.1 Fuerzas de van der Waals

Éste es un mecanismo de enlace que se genera debido a cargas residuales. Relaciona moléculas neutras y unidades estructurales sin carga en una estructura cohesiva, en virtud de pequeñas cargas eléctricas residuales en sus superficies.

En él, los electrones que se encuentran en los orbitales de los átomos generan ciertos movimientos para interactuar de manera sincronizada y, de esta forma, permanecer alejados tanto como sea posible de modo que se produzca una atracción dipolo instantánea débil entre los átomos. Esto resulta en una pequeña concentración de carga positiva y, consecuentemente, resultará en una carga negativa pequeña en el otro extremo. La carga positiva neta en un lado de la molécula atrae electrones de la molécula vecina con carga negativa. Dicho dipolo podrá inducir un efecto similar en los átomos vecinos, lo que hará que toda la estructura molecular se una por este débil efecto dipolar. Tal unión es especialmente efectiva a grandes distancias en estructuras moleculares.

En la formación de cristales, estas moléculas están alineadas con polos negativos contra polos positivos de moléculas vecinas.

Cuando las fuerzas de van der Waals están presentes en los minerales, definen algunas propiedades clave como una zona de fragilidad y baja dureza. Recordemos que es el más débil de los enlaces químicos.

Por ejemplo, el grafito mineral consiste en láminas de átomos de carbono unidas covalentemente. Éstas, a su vez, están unidas únicamente por enlaces de van der Waals (Figura 4.65). Este mecanismo de unión débil permite que el grafito se use como "tinta" en los lápices. El grafito se rompe fácilmente, dejando una marca en el papel, debido a que tiene una dureza de 1-2 en la escala de Mohs.

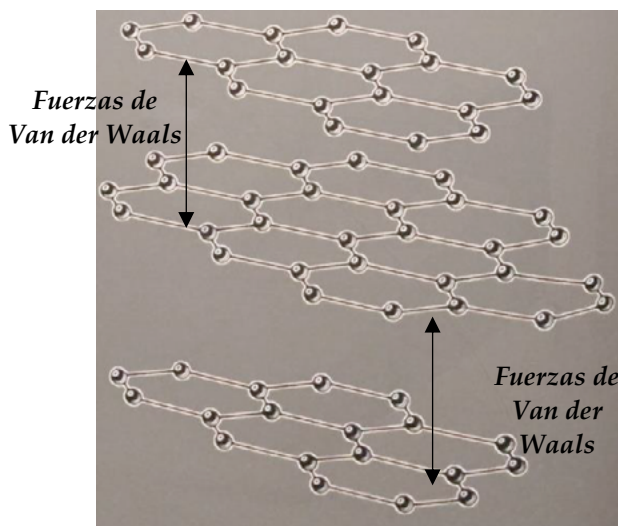


Figura 4.65. Representación de la estructura del grafito con enlace covalente entre átomos de carbono y enlace residual (van der Waals) entre capas, modificada del mineral science.



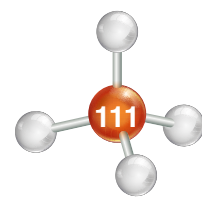
## 4.11 Autoevaluación

### Cuestionario de autoevaluación del Capítulo 4

#### Cuestionario de autoevaluación tema 4.2

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

- Concepto que describe la formación de un enlace entre dos átomos al superponer o traslapar orbitales atómicos, lo que origina una zona común de alta densidad electrónica con dos electrones de espines apareados.
  - Teoría de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia
  - Teoría del orbital molecular
  - Teoría de enlace valencia
  - Estructura de Lewis
- Requisito necesario para que un enlace se forme entre dos átomos.
  - Que los orbitales pertenezcan a la capa de valencia
  - Que contengan electrones desapareados
  - Que contengan energía semejante
  - Todas son correctas
- Definición de enlace.
  - Unión de dos o más átomos con el fin de alcanzar la estabilidad y tratar de parecerse a un gas noble
  - Unión de dos o más átomos con el fin de crecer
  - Unión de electrones
  - Unión de protones
- Unión que se establece cuando dos átomos comparten los electrones que se encuentran en la capa más externa o de valencia.
  - Enlace iónico
  - Enlace covalente
  - Enlace electrovalente
  - Enlace metálico
- Selecciona la opción que contenga una característica de las sustancias covalentes:
  - No son buenos conductores del calor y la electricidad
  - Poseen puntos de fusión y ebullición altos
  - No son solubles ni en agua ni en disolventes orgánicos
  - Generalmente poseen densidades altas
- Se genera cuando los átomos comparten, de manera equitativa, electrones para formarlo. La diferencia de electronegatividad es igual a cero.
  - Enlace iónico
  - Enlace covalente puro
  - Enlace covalente polar
  - Enlace metálico
- Enlace que se genera cuando los electrones enlazantes no son compartidos de forma equitativa por los átomos. La diferencia de electronegatividad es diferente de cero.
  - Enlace covalente polar
  - Enlace covalente puro
  - Enlace iónico
  - Enlace coordinado o dativo
- Enlace que se forma cuando dos átomos comparten electrones, pero sólo uno de ellos aporta el par electrónico de enlace. El átomo que aporta el par de electrones se denomina dador y el que lo recibe, receptor.
  - Enlace covalente polar
  - Enlace covalente coordinado o dativo
  - Enlace covalente puro
  - Enlace iónico





9. Enlace que se genera debido a la atracción electrostática entre iones de signo distinto.
  - a) Enlace covalente coordinado o dativo
  - b) Enlace covalente puro
  - c) Enlace iónico
  - d) Enlace covalente polar
10. La llamada cal viva está compuesta por óxido de calcio (CaO) y se utiliza en la industria de la construcción con el fin de darle cohesión a los materiales de edificación. Determine qué tipo de enlace se forma en este compuesto
  - a) Iónico
  - b) Covalente
  - c) Metálico
  - d) Ninguno

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

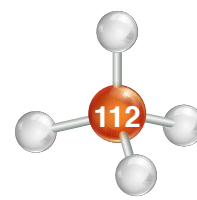
Cap. 21

Cap. 22

### Cuestionario de autoevaluación tema 4.3

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

1. Molécula compuesta por dos átomos del mismo elemento.
  - a) Molécula diatómica
  - b) Molécula poliatómica
  - c) Molécula no lineal
  - d) Molécula polar
2. Fuerzas entre las moléculas que conforman a una sustancia, de menor intensidad que las fuerzas de enlace y pueden ayudar a predecir o determinar algunas de las propiedades físicas de las sustancias.
  - a) Fuerzas intramoleculares
  - b) Fuerzas intermoleculares
  - c) Fuerzas electrónicas
  - d) Fuerzas moleculares
3. Ejemplo de tres fuerzas intermoleculares:
  - a) Fuerzas ion-molécula, fuerzas de dispersión, fuerzas de van der Waals
  - b) Fuerzas ion-ion, fuerzas dipolo-dipolo, fuerzas de dispersión
  - c) Fuerzas molécula-molécula, fuerzas protón-electrón, fuerzas dipolo-dipolo
  - d) Fuerzas partícula-partícula, fuerzas molécula-molécula, fuerzas de dispersión
4. Fuerzas que sugen entre iones de cargas iguales o diferentes, bajo las condiciones siguientes: los iones que poseen cargas de signo contrario se atraen y los iones que poseen cargas con signos iguales se repelen.
  - a) Fuerzas ion-dipolo
  - b) Fuerzas dipolo-dipolo
  - c) Fuerzas ion-ion
  - d) Fuerzas ion-dipolo inducido
5. Fuerzas generadas por la atracción electrostática entre un ion y una molécula polar.
  - a) Fuerzas ion-ion
  - b) Fuerzas ion-dipolo inducido
  - c) Fuerzas ion-dipolo
  - d) Fuerzas de dispersión
6. Término que agrupa a las fuerzas de atracción entre moléculas polares o no polares, consideradas, generalmente, débiles.
  - a) Fuerzas ion-dipolo
  - b) Fuerzas de van der Waals
  - c) Fuerzas de dispersión
  - d) Puentes de hidrógeno
7. Fuerzas de naturaleza electrostática generadas cuando el extremo positivo de una molécula polar interacciona con la parte negativa de otra molécula polar.
  - a) Fuerzas dipolo-dipolo
  - b) Fuerzas dipolo-dipolo inducido
  - c) Fuerzas ion-dipolo
  - d) Fuerzas de dispersión







8. Tipo especial de las fuerzas dipolo-dipolo, que sólo se presenta entre moléculas que contienen enlaces covalentes O-H, N-H y F-H en su estructura.
  - a) Fuerzas de dispersión
  - b) Fuerzas dipolo-dipolo inducido
  - c) Puentes de hidrógeno
  - d) Fuerzas ion-dipolo
9. Fuerzas que se establecen cuando un ion o una molécula polar, se acerca a una molécula no polar, debido a que la distribución electrónica de esta última tiende a distorsionarse gracias a la fuerza que ejerce el ion o la molécula polar, dando lugar a una clase de dipolo.
  - a) Fuerzas de dispersión
  - b) Fuerzas dipolo-dipolo
  - c) Fuerzas ion-dipolo
  - d) Puentes de hidrógeno
10. Tipo de fuerzas generadas por la interacción entre moléculas polares y no polares. La carga de una molécula polar provoca una distorsión en la nube electrónica de la molécula no polar, convirtiéndola, de manera transitoria, en un dipolo y en ese momento se genera la atracción entre las moléculas.
  - a) Fuerzas dipolo-dipolo
  - b) Fuerzas de dispersión
  - c) Fuerzas ion-dipolo
  - d) Fuerzas dipolo-dipolo inducido

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

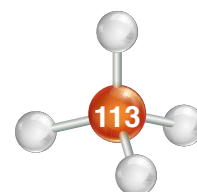
Cap. 22

### Cuestionario de autoevaluación tema 4.4

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

1. ¿Qué son las estructuras de Lewis?
  - a) Representaciones bidimensionales de los pares de electrones enlazantes y libres
  - b) Representaciones bidimensionales de los enlaces iónicos
  - c) Representaciones bidimensionales de los enlaces covalentes
  - d) Representaciones bidimensionales de los gases nobles
2. ¿Qué enuncia la regla del octeto, elaborada por Gilbert Newton Lewis?
  - a) Establece el enlace de ocho moléculas
  - b) Establece la relación entre ocho enlaces iónicos
  - c) Establece el enlace entre átomos con el fin de generar estabilidad, llenando sus últimos niveles de energía con ocho electrones
  - d) Establece la forma en que ocho átomos se pueden enlazar
3. Selecciona la opción que contenga una de las reglas para escribir correctamente la estructura de Lewis.
  - a) Para escribir la estructura de Lewis no se toma en cuenta la electronegatividad
  - b) Para saber el número de electrones en la capa de valencia se utiliza el período
  - c) Una vez que se sabe el número de electrones disponibles se representan por medio de puntos
  - d) Los electrones enlazantes son representados por puntos y los libres por guiones
4. Complete la siguiente tabla, puedes ayudarte de tu tabla periódica.

Elemento	Electrones de Valencia	Estructura de Lewis
Litio	1	Li •
Silicio		







Aluminio		
Neón		
Fósforo		

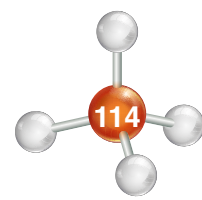
5. Mediante la estructura de Lewis, represente cada una de las siguientes moléculas. Incluye algún mineral cuya composición es la fórmula química.

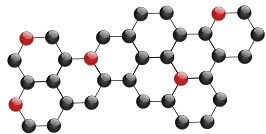
Molécula	Estructura de Lewis	Mineral
SiO <sub>2</sub>		
SnO <sub>2</sub>		

### Cuestionario de autoevaluación tema 4.5

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

- La Teoría de Repulsión de los Pares Electrónicos de la Capa de Valencia fue propuesta por primera vez en los años 40 por Sidgwick y Powell, sin embargo, fue desarrollada por:
  - Gilbert Newton Lewis
  - Linus Pauling
  - Gillespie y Nyholm
  - John Dalton
- Noción basada en el grado de repulsión electrostática de los pares de electrones de valencia alrededor del átomo, ya que éstos se repelen entre sí, proporcionando la adopción de una disposición espacial determinada, la cual tratará de minimizar dicha repulsión.
  - Estructura de Lewis
  - Teoría de Repulsión de los Pares Electrónicos de la Capa de Valencia
  - Teoría de Enlace Valencia
  - Geometría Molecular
- Son tres de las seis geometrías electrónicas que puede tener una molécula:
  - Lineal, octaédrica y bipiramidal trigonal
  - Cúbica, cilíndrica y esférica
  - Rectangular, triangular y romboedral
  - Lineal, tetraédrica y esférica





4. Selecciona cuál de estas oraciones es correcta.

- a) La geometría electrónica lineal menos estable
- b) Las repulsiones se escriben en orden de mayor a menor intensidad de la siguiente forma PNE-PNE>PNE-PE>PE-PE
- c) Los números de pares enlazantes y no enlazantes pueden ser números racionales
- d) El ángulo que se forma entre dos pares enlazantes será más grande que el formado por dos pares no enlazantes

5. De acuerdo con las siguientes moléculas, escribe su geometría electrónica.

Molécula	Estructura de Lewis	No. de pares enlazantes	No. de pares no enlazantes	No. total de pares de e <sup>-</sup> en el átomo central	Geometría electrónica
CH <sub>4</sub>					
BeCl <sub>2</sub>					
BF <sub>3</sub>					
NH <sub>3</sub>					
PCl <sub>5</sub>					

### Cuestionario de autoevaluación tema 4.6

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

1. Condiciones que se deben cumplir para que una molécula sea polar:

- a) Debe existir al menos un enlace polar o un par de electrones no enlazantes en el átomo central y, los enlaces polares, si existiera más de uno, deben tener una distribución que no

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

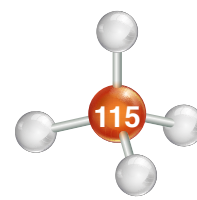
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

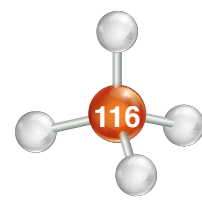
Cap. 21

Cap. 22





- cancela su polaridad (dipolo de enlace) y, si hay dos o más pares de electrones no enlazantes en el átomo central, deben tener una distribución que no cancela su polaridad
- No deben existir electrones libres en el átomo central y se debe cancelar la polaridad de los enlaces
  - Deben existir pares de electrones enlazantes en el átomo central y se debe cancelar la polaridad de los enlaces
  - Ninguna de las anteriores.
2. Disposición espacial de los átomos que constituyen la molécula, determinada por la orientación relativa de sus enlaces covalentes. Influye en las propiedades físicas y químicas de la molécula.
- Geometría electrónica
  - Estructura de Lewis
  - Geometría molecular
  - Polaridad molecular
3. Propiedades de la molécula influidas por la geometría molecular:
- Color, fase, polaridad
  - Color, dureza, punto de ebullición
  - Dureza, color, punto de fusión
  - Fase, conductividad, punto de fusión
4. Diferencia entre geometría electrónica y geometría molecular.
- La distribución de los electrones libres y enlazantes
  - La geometría molecular excluye a los pares de electrones libres y sólo toma en cuenta la distribución de los átomos enlazados alrededor del átomo central, mientras que la electrónica, se refiere a la distribución geométrica de todos los grupos de electrones
  - Una toma electrones y la otra, moléculas
  - Ninguna de las anteriores
5. La geometría molecular está determinada por:
- Tipo de molécula
  - El momento dipolar
  - El átomo central y el (los) periférico(s)
  - Distancia de enlace y ángulo de enlace
6. Teoría principal de apoyo para determinar la geometría molecular, la cual considera que la disposición espacial de los átomos que constituyen a una molécula dependerá de la cantidad de pares electrónicos (enlazantes o libres) que existen alrededor de cada átomo central, así como también, de la repulsión existente entre éstos.
- Teoría del orbital molecular
  - Teoría de enlace valencia
  - Teoría de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia
  - Teoría de Arrhenius
7. Los pares de electrones de enlace se forman por dos, cuatro o seis electrones compartidos por dos átomos, dependiendo de los electrones que se compartan se formarán enlaces:
- Sencillo, doble y triple
  - Sencillo, compuesto y triple
  - Simple, cargado y neutro
  - Ninguno es correcto
8. Son tres de las cinco geometrías moleculares principales.
- Trigonal, lineal, heptagonal
  - Lineal, tetragonal, hexagonal
  - Hexagonal, doble, triple
  - Lineal, trigonal, octaédrica
9. Selecciona la opción que describa correctamente a la geometría lineal.





- a) La geometría lineal es la más estable de todas
- b) La geometría lineal consta de un átomo central y tres átomos periféricos
- c) La geometría lineal tiene ángulos de enlace de  $90^\circ$
- d) La geometría lineal tiene tres vertientes: lineal, en forma de V y paralela

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

10. Durante la erupción de un volcán existen distintos gases que se liberan a la atmósfera. Uno de ellos es el dióxido de carbono  $\text{CO}_2$ , molécula relativamente simple, pero que en grandes cantidades puede contribuir negativamente en el ambiente, aumentando la temperatura de nuestro planeta. Determine su geometría molecular.

### Cuestionario de autoevaluación tema 4.7

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

1. Opción que enuncia las tres fases de la materia:

- a) Sólido, líquido y plasma
- b) Sólido, líquido y gaseoso
- c) Dúctil, viscoso, gaseoso
- d) Sólido, viscoso, gaseoso

2. Sustancias que en esta fase se caracterizan por tener una forma y volumen constantes, por ser rígidas o duras y poseen una fluidez muy baja o nula.

- a) Fase gaseosa
- b) Fase líquida
- c) Fase sólida
- d) Ninguna de las anteriores

3. Sustancias que en esta fase son capaces de fluir y pueden adoptar la forma del recipiente que los contiene.

- a) Fase líquida
- b) Fase sólida
- c) Fase gaseosa
- d) Ninguna de las anteriores

4. Sustancias que en esta fase no poseen una forma definida, son capaces de expandirse indefinidamente o a lo largo del recipiente que las contiene y tienen una alta compresibilidad.

- a) Fase sólida
- b) Fase líquida
- c) Fase gaseosa
- d) Ninguna de las anteriores

5. Con la Teoría cinético-molecular se puede:

- a) Explicar el comportamiento de la materia, así como los cambios que sufre
- b) Determinar que la materia se compone de partículas muy grandes en estado estático
- c) Observar que la energía cinética de las partículas disminuirá al incrementar la temperatura
- d) Constatar que la fase no puede ser modificada al cambiar la energía cinética de sus partículas

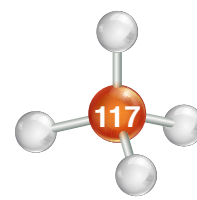
6. Proceso mediante el cual un sólido pasa a la fase líquida.

- a) Solidificación
- b) Fusión
- c) Sublimación
- d) Evaporación

7. Atracción que existe entre las moléculas que mantiene unidas a las partículas de una sustancia.

- a) Cohesión
- b) Adhesión
- c) Absorción
- d) Adsorción

8. Interacción entre las superficies de distintos cuerpos cuando entran en contacto.





- a) Cohesión
- b) Adhesión
- c) Absorción
- d) Adsorción

9. Fenómeno de superficie que genera que la superficie de un líquido se comporte como una membrana o película, con resistencia a la deformación.

- a) Capilaridad
- b) Fusión
- c) Tensión superficial
- d) Adhesión

10. Fenómeno de superficie que produce elevación o depresión de un líquido en un tubo estrecho.

- a) Capilaridad
- b) Fusión
- c) Tensión superficial
- d) Adhesión

### Ejercicios

#### 4.2 Teoría de enlace valencia (TEV). Enlace iónico. Enlace covalente: puro, polar, coordinado

1. Al analizar un núcleo para determinar el potencial de explotación en una mina se encuentran los siguientes compuestos: agua (H<sub>2</sub>O), metano (CH<sub>4</sub>), yoduro de potasio (KI), cloruro de cobre (CuCl<sub>2</sub>) y dióxido de azufre (SO<sub>2</sub>). Clasifique los compuestos como polares, no polares o iónicos en la tabla.

Compuesto	Polar	No Polar	Iónico
H <sub>2</sub> O			
CH <sub>4</sub>			
KI			
CuCl <sub>2</sub>			
SO <sub>2</sub>			

#### Enlace iónico

2. Representar el enlace que forma la Halita, cuya fórmula es NaCl (Cloruro de Sodio).

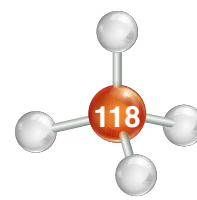
#### Enlace covalente

3. Determinar la estructura de Lewis del Cuarzo SiO<sub>2</sub> (Dióxido de Silicio)

4. Un mineral es un sólido inorgánico formado de manera natural que posee una estructura atómica ordenada y una composición química definida. Los minerales presentan ciertas propiedades que permiten clasificarlos de manera general a partir del análisis de una muestra de mano. Entre estas propiedades se encuentran el color, el brillo, la dureza, el peso específico, la fractura o clivaje, entre otras.

Un enlace covalente se forma cuando dos átomos comparten sus electrones de valencia para completar el octeto de electrones y que la molécula adquiera estabilidad.

Determine la estructura de Lewis del cuarzo (SiO<sub>2</sub>)





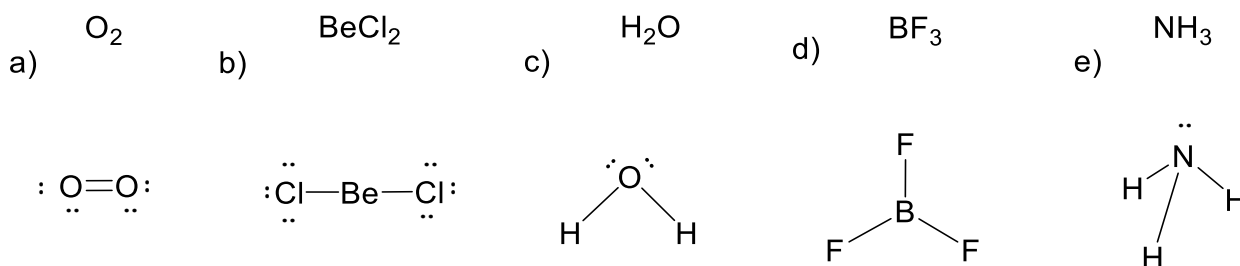


### 4.3 Fuerzas intermoleculares

1. En una celda PVT existen moléculas de cloruro de yodo, ICl, y moléculas de agua. Indique los enlaces existentes y las interacciones electrostáticas que surgen entre las moléculas en ambos compuestos.

### 4.5 Teoría de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia

1. De acuerdo con la estructura de Lewis establezca la geometría molecular de cada una de las siguientes sustancias extraídas por cromatografía.

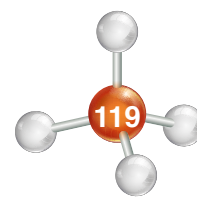
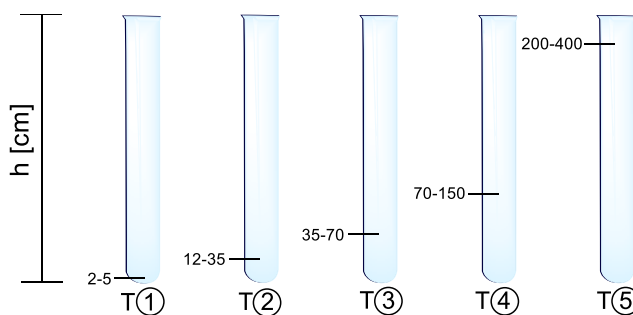


### 4.6 Geometría molecular y polaridad con respecto a átomos centrales

1. En una toma de gases se detecta metano ( $CH_4$ ) y tricloruro de fósforo ( $PCl_3$ ). A partir de su estructura de Lewis dibuje su geometría molecular.

### 4.7 Fases: sólida, líquida y gaseosa. Fenómenos de superficie: tensión superficial, capilaridad

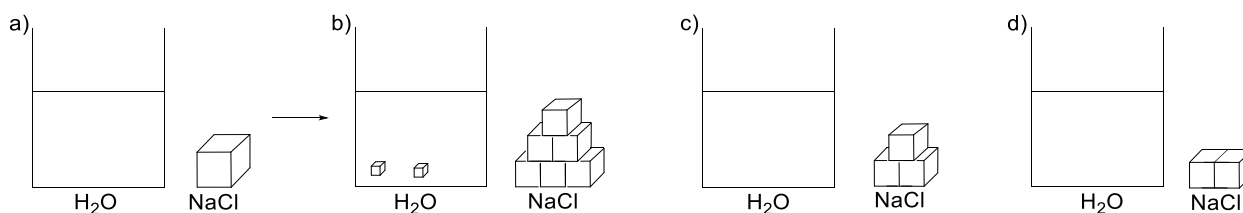
1. Un grupo de geología decidió hacer un experimento con tubos de ensayo llenos de partículas diversas: arena gruesa, arena, arenas finas, limos y arcillas, pero olvidó rotular los tubos a partir de la altura que alcanzó el agua. Rotule los tubos considerando que la altura que alcanza el agua por capilaridad es directamente proporcional a la finura de las partículas; es decir, inversamente proporcional a su tamaño.





### 4.8 Disoluciones: diluidas, saturadas y sobresaturadas. Disoluciones verdaderas. Suspensiones. Coloides

1. Unos alumnos de la Facultad de Ingeniería quieren hacer un folleto ilustrando los tipos de disoluciones, sin embargo, olvidaron rotular las imágenes. Rotula el tipo de disolución a partir de la cantidad relativa de soluto diluido a temperatura constante, de manera cualitativa.



### 4.9 Conductividad eléctrica de algunas sustancias

1. Complete la tabla que ilustra si existe o no la conductividad en la mezcla seleccionada y justifique su respuesta.

Mezcla	¿Existe conductividad eléctrica?	Explicación
Agua destilada y azúcar		
Agua de mesa y sal		
Agua de mesa y jugo de limón		
Agua de mesa		
Agua de mesa y vinagre		



# Capítulo 5

## Teoría de orbitales moleculares y cristalografía

Ana Paulina Gómora Figueroa, Diego Solís Ibarra, Gerardo Barón Sánchez

### 5.1 Introducción

En este capítulo se hablará acerca de la teoría de los orbitales moleculares tanto para moléculas diatómicas homonucleares como heteronucleares y la relación entre ambas.

Por otro lado, también se mencionará el enlace metálico y algunos modelos de empaquetamiento. Asimismo, se hablará de la teoría de bandas y la estructura de bandas tanto para metales como para aislantes y semiconductores; posteriormente se profundizará en estos dos últimos y los superconductores.

Por último, se mencionará el tema de cristalografía que incluye las celdas unitarias y los diferentes tipos de cristales, así como el empaquetamiento de esferas y el empaquetamiento compacto.

### Sumario

#### 5.1 Introducción

#### 5.2 Teoría de orbitales moleculares para moléculas diatómicas

#### 5.3 Enlace metálico

#### 5.4 Teoría de bandas

#### 5.5 Aislantes, semiconductores, conductores y superconductores

#### 5.6 Cristales: celdas unitarias y tipos de cristales

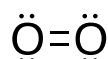
#### 5.7 Autoevaluación

### 5.2 Teoría de orbitales moleculares para moléculas diatómicas

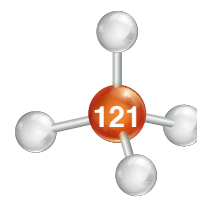
#### 5.2.1 Orbitales moleculares

Comúnmente, los estudiosos acuden a dos teorías para describir los enlaces de las moléculas: la Teoría de Enlace Valencia (TEV) (descrita en el Capítulo 4) y la Teoría de Orbitales Moleculares (TOM). Históricamente, ha habido disputas sobre cuál de las dos teorías describe mejor las propiedades observadas en las moléculas; sin embargo, no es posible establecer si alguna teoría es superior y excluir a la otra. En la química, sobre todo en la química inorgánica, es necesario manejar ambas teorías por ser consideradas complementarias.

En algunos casos, la TEV no explica de manera satisfactoria las propiedades de las moléculas, como es el potencial de ionización y el magnetismo. Por ejemplo, para la molécula del oxígeno diatómico ( $O_2$ ), la estructura de Lewis es la siguiente:



De acuerdo con esta estructura todos los electrones en la molécula de  $O_2$  se encuentran apareados y la molécula debería ser diamagnética, no obstante, se ha comprobado experimentalmente que la molécula de oxígeno es paramagnética con dos electrones desapareados (ver Capítulo 2). En este sentido, la TOM justifica satisfactoriamente las propiedades magnéticas del oxígeno.





Otra característica importante de la TOM consiste en la descripción de orbitales antienlazantes. Un enlace se forma cuando un orbital enlazante está lleno y su antienlazante está vacío. Si un electrón localizado en un orbital enlazante es excitado a su antienlazante, el enlace se rompe. De esta manera puede explicarse cualitativamente que la radiación electromagnética (ej. ultravioleta) sobre las moléculas puede desestabilizar, incluso romper los enlaces químicos.

### 5.2.2 Funciones de onda y orbitales atómicos

El átomo de hidrógeno consta de un núcleo (un protón) y un electrón. A pesar de que no es posible determinar con exactitud la posición de este electrón, sí es posible calcular la probabilidad de encontrar al electrón en cualquier punto del núcleo. En el caso particular del átomo de hidrógeno, la distribución de probabilidad es esférica alrededor del núcleo, por lo que es posible dibujar una frontera superficial esférica, dentro de la cual existe el 95% de encontrar al electrón. El electrón tiene energía y distribución espacial fijas denominadas *orbital*. Ahora bien, en el átomo de helio hay dos electrones asociados con el núcleo del helio. Los electrones tienen la misma distribución espacial y energía (ocupan el mismo orbital), pero difieren en su espín (Principio de exclusión de Pauli) (Figura 5.1). En general los electrones en núcleos atómicos ocupan orbitales de energía y distribución espacial fijas, y cada orbital puede contener un máximo de dos electrones con espines anti-paralelos.

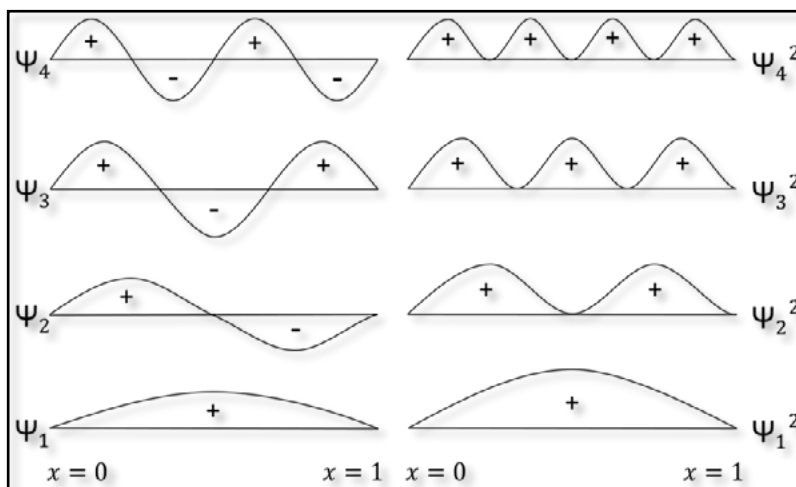


Figura 5.1. Funciones de onda que describen un estado o posible condición de los electrones en el átomo y cada una está asociada con una energía, la cual es la energía total (cinética más potencial) del electrón cuando está en el estado descrito por la función.

En física, los orbitales atómicos son descritos por funciones de onda, y al ser resueltas y representadas gráficamente en 3-D adquieren la forma de los diferentes Orbitales Atómicos (OA) (ver Figura 5.1).

Consideremos el siguiente ejemplo: dos átomos de hidrógeno A y B forman un enlace entre sí. Los orbitales atómicos de dichos átomos se representan por las funciones de onda  $\Psi_A$  y  $\Psi_B$ , respectivamente. De acuerdo con las reglas de configuración electrónica molecular los Orbitales Moleculares (OM) resultantes

que describen al enlace A-B son:

$$\Psi_b = \Psi_A + \Psi_B \quad \text{OM enlazante}$$

$$\Psi_a = \Psi_A - \Psi_B \quad \text{OM antienlazante}$$

En el caso del orbital  $\Psi_a$  (OM enlazante) las funciones de onda de cada OA son aditivas, es decir, que la ecuación resultante (OM) es estable en la región entre los núcleos de los OA  $\Psi_A$  y  $\Psi_B$ . La probabilidad de encontrar al electrón del hidrógeno molecular es alta. Mientras que en el caso del OM antienlazante,  $\Psi_b$ , las funciones de onda de los OA se cancelan, dando lugar a la formación de un nodo entre los núcleos. Esto es, la probabilidad de encontrar al electrón es muy baja o nula.



### 5.2.3 Orbitales moleculares

La descripción de un enlace en una molécula puede entenderse como la compartición de electrones entre átomos. Es posible visualizar dicha compartición mediante la aproximación de dos átomos entre sí. Cada átomo cuenta con orbitales atómicos (dichos orbitales atómicos están descritos por funciones de onda). Entonces, al acercarse dos átomos para formar un enlace, los orbitales atómicos de estos se mezclan y forman orbitales moleculares. Los OM resultantes son análogos a los OA que componen a la molécula. Los electrones de los OA se colocarán en los OM formados y participarán en la formación del enlace en la molécula (Figura 5.2). La diferencia entre un orbital molecular y un orbital atómico es que un orbital atómico está asociado a un solo átomo.

Al método anteriormente descrito se le conoce como *combinación lineal de orbitales atómicos* o *CLOA* (LCAO, por sus siglas en inglés). El CLOA asume que se pueden aproximar los OM correctos a través de la combinación de OA de los átomos que forman a la molécula. Por lo tanto, la combinación de “n” orbitales atómicos resulta en la generación de “n” orbitales moleculares que pueden ser enlazantes (si forman enlace), antienlazantes (si desestabilizan el enlace) y no enlazantes (ni forman ni desestabilizan al enlace). De hecho, un OM enlazante tiene menor energía y, por tanto, mayor estabilidad que los OA que lo forman. Por otro lado, un OM antienlazante tendrá mayor energía y menor estabilidad que los OA que lo formaron. Dado lo anterior, la densidad electrónica en los

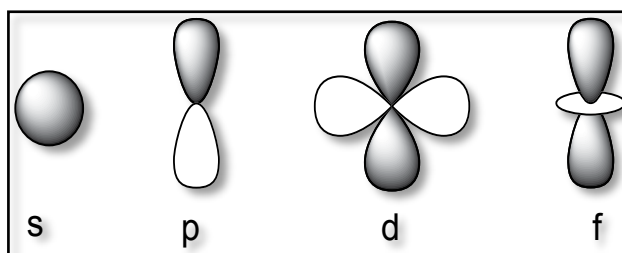


Figura 5.2. Representación gráfica de orbitales atómicos: s, p, d, f.

OM enlazantes es máxima entre los núcleos de los átomos que se enlazan.

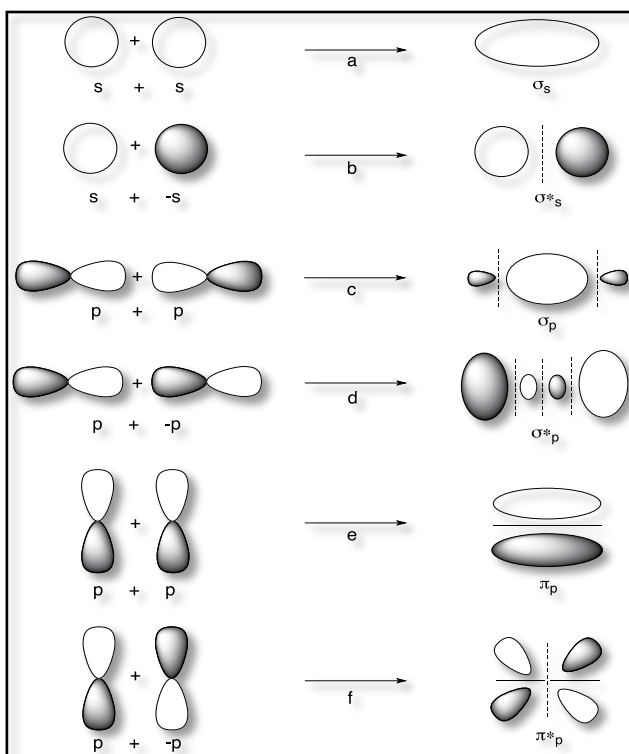


Figura 5.3. Simetría de orbitales moleculares de enlace (a, c, e) y antienlace (b, d, f), formados a partir de orbitales atómicos s y p.

Algunas de las posibles combinaciones de orbitales atómicos son mostradas en la Figura 5.3. Los orbitales que son simétricos cerca del eje internuclear son llamados *orbitales sigma* ( $\sigma$ ), análogo al orbital atómico s, el cual presenta la simetría más alta. Si el eje internuclear yace sobre un plano nodal, se forma un *enlace pi* ( $\pi$ ). Dicho plano nodal entre los núcleos significa que la densidad electrónica es de cero. En el caso de los *orbitales delta* ( $\delta$ ), el eje internuclear yace en dos planos nodales perpendiculares entre sí. Todos los orbitales antienlazantes poseen un plano nodal adicional, el cual es perpendicular al eje internuclear y yace entre los núcleos. Adicionalmente, los orbitales moleculares pueden o no tener un centro de simetría.





### 5.2.4 Configuración de orbitales moleculares

Para comprender las propiedades de las moléculas es necesario conocer cómo se encuentran distribuidos los electrones entre los orbitales moleculares, es decir, su configuración electrónica. El procedimiento para determinar la configuración electrónica de una molécula es análogo al que se utiliza para determinar la configuración electrónica de los átomos.

Las siguientes son las reglas que rigen la configuración electrónica molecular:

1. El número de OM formados siempre es igual al número de OA combinados.
2. Entre más estable sea el OM enlazante, menor estabilidad tendrá el OM antienlazante.
3. El llenado de los OM se realiza a partir de la energía más baja hasta la más alta (Principio de Aufbau). En una molécula estable el número de electrones en los OM enlazantes siempre es mayor que aquellos en los OM antienlazantes, debido a que los electrones ocupan primero los orbitales de más baja energía (Figura 5.4).
4. Al igual que un OA, cada OM puede acomodar hasta dos electrones con espín opuesto, de acuerdo con el principio de exclusión de Pauli.
5. Para los electrones que ocupan OM de la misma energía, la configuración más estable es determinada por la regla de Hund, es decir, los electrones que ocupen dichos OM tendrán espines paralelos.
6. El número de electrones en los OM es igual a la suma de todos los electrones de los átomos que participan en el enlace.

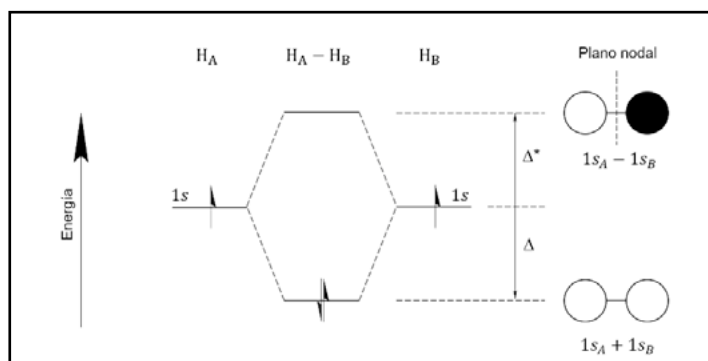


Figura 5.4. Los electrones que participan en la formación de un enlace ocuparán primero los orbitales moleculares enlazantes, debido a que estos poseen menor energía.

### 5.2.5 Moléculas diatómicas

Las moléculas diatómicas pueden ser divididas en dos grupos: las **homonucleares** (compuestas por dos átomos iguales) y las **heteronucleares** (compuestas por dos átomos diferentes). Antes de describir a estos dos grupos de moléculas diatómicas a través de la TOM es necesario considerar que la interacción entre dos orbitales atómicos es mayor cuanto mayor es su traslape y menor sea la diferencia de energía entre estos. Los traslapes pueden ser de dos tipos: **traslape por distancia** y **traslape por orientación y simetría**.

El caso de traslape por distancia puede observarse en la Figura 5.5, si los átomos que participan en la formación de un enlace (A y B) se encuentran a una distancia relativamente grande, la combinación de OA dará lugar a la formación de OM poco estables. Nótese que la diferencia de energía entre los OM enlazantes y antienlazantes es pequeña. Ahora bien, cuando los mismos átomos, A y B, se encuentran más cerca entre sí para llevar a cabo el enlace, el traslape de orbitales es más efectivo, y, por tanto, el enlace resultante más estable ya que los OM de la molécula resultante tienen mucha menor energía que los OA de los átomos que la componen. Adicionalmente, la diferencia de energía entre los OM enlazantes y antienlazantes es mayor que cuando el traslape entre orbitales es menor.

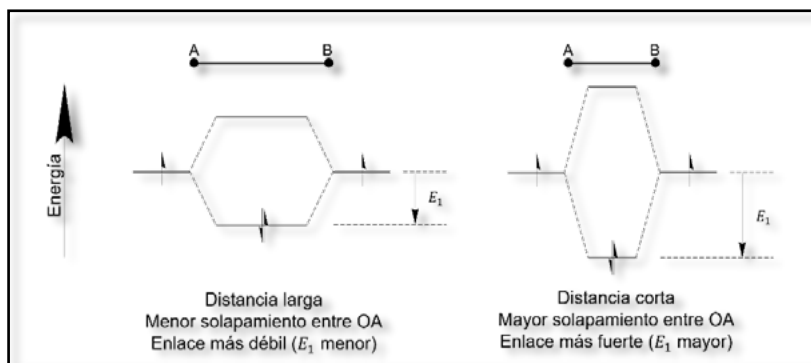


Figura 5.5. Estabilidad de enlaces por traslape de OA a diferente distancia.

En el caso del traslape de OA por orientación y simetría, el traslape será máximo cuando los orbitales participantes tengan la misma simetría. Mientras que los orbitales con distinto comportamiento de simetría no se traslapan entre sí (Figura 5.6).

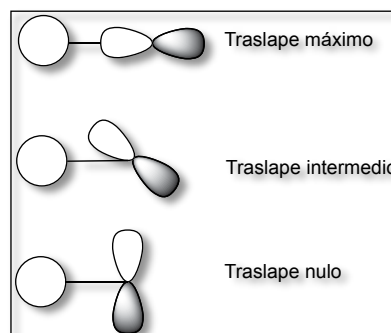


Figura 5.6. Traslape por orientación y simetría.

Finalmente, cuando se combinan OA de distinta energía para la formación de OM, participa, en mayor proporción, el OA de energía más parecida al orbital molecular resultante (Figura 5.7). En otras palabras, los electrones serán “controlados” por el OM más parecido al OA del átomo “dominante”.

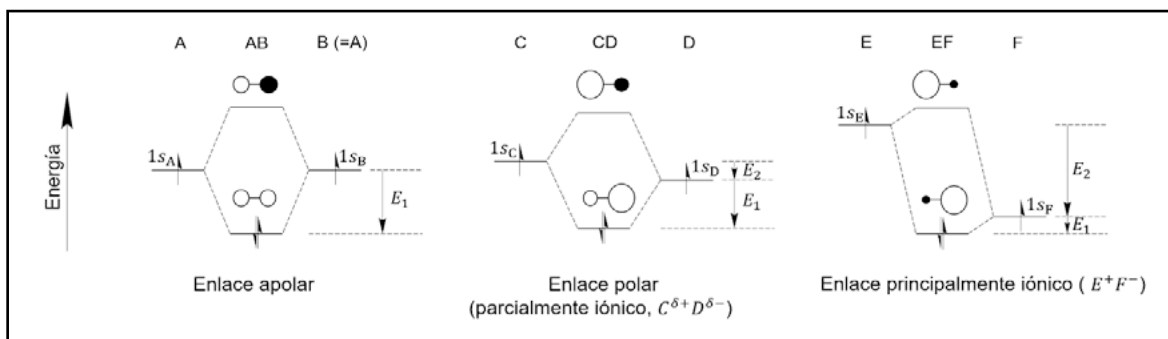


Figura 5.7. Para el sistema AB, la contribución de cada átomo es equivalente ya que los OA de A y B se encuentran a la misma energía. En el caso de C y D, el orbital atómico de D contribuye en mayor proporción al OM de enlace, mientras que el OA de C contribuye al OM de antienlace. Finalmente, para E y F el OA de F “domina” casi por completo el comportamiento del OM de enlace, y el OM de antienlace es dominado por el OA de E.

### 5.2.5.1 Moléculas diatómicas homonucleares del primer periodo

Las moléculas que contienen dos átomos del mismo elemento son las más simples de discutir los ejemplos más sencillos son las de hidrógeno ( $H_2$ ) y helio ( $He_2$ ). Empleando la Figura 5.8 es posible discernir las estabildades relativas del  $H_2$  y  $He_2$ , así como las especies derivadas de éstas;  $H_2^+$  y  $He_2^+$ .



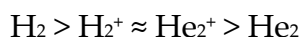
Los orbitales  $\sigma_{1s}$  y  $\sigma^*_{1s}$  pueden acomodar un máximo de cuatro electrones. El número total de electrones va desde uno para  $H_2^+$ , hasta cuatro para  $He_2$ . Cada orbital molecular puede acomodar un máximo de dos electrones con espines opuestos (Principios de exclusión de Pauli y Hund, respectivamente). Una vez construidas las configuraciones electrónicas es posible realizar una comparación sobre la estabilidad de las especies, la cual es determinada por su orden de enlace (OE). Esto es:

$$O.E. = \frac{1}{2} (\#e^- \text{ en OM enlazantes} - \#e^- \text{ en OM antienlazantes})$$

El orden de enlace indica la fuerza aproximada de un enlace. De acuerdo con la formula anterior, el orden de enlace para las moléculas de hidrógeno y helio son:

Especie	$H_2^+$	$H_2$	$He_2^+$	$He_2$
Número de electrones participantes en enlace	1	2	3	4
Orden de Enlace	1/2	1	1/2	0

Como se observa en la tabla anterior, el orden de enlace puede tener un valor entero o fraccionario. Los casos donde el valor de orden de enlace es cero indica que el enlace no tiene estabilidad, y, por tanto, la molécula no puede existir. De esta manera, la estabilidad de las especies antes descritas puede clasificarse de la siguiente manera:



El orden de enlace puede ser utilizado para comparaciones cualitativas únicamente. Por ejemplo, tanto un enlace  $\sigma$  de un OM con dos electrones y un enlace  $\pi$  de un OM con dos electrones, dan lugar a un orden de enlace de uno. Sin embargo, estos dos enlaces difieren en su fuerza de enlace y distancia debido a las diferencias en el traslape de orbitales atómicos.

### 5.2.5.2 Moléculas diatómicas homonucleares del segundo periodo

Para los elementos del segundo periodo, los orbitales moleculares se forman por el traslape de orbitales atómicos  $1s$ ,  $2s$  y  $2p$ . Nótese que hay tres orbitales  $p$  para cada átomo de un elemento del segundo periodo, el traslape constructivo de los OA  $p$  da lugar a la formación de un OM  $\sigma$  y dos OM  $\pi$  de enlace. El OM  $\sigma$  se forma por el traslape de los OA  $2p_x$ , a lo largo del eje  $x$ . Los OA  $2p_y$  y  $2p_z$  son perpendiculares al eje  $x$  y se traslapan lateralmente para formar dos OM tipo  $\pi$ . Por lo general el traslape de los OA  $p$  es mayor en un orbital molecular  $\sigma$  que en uno  $\pi$ , por lo que se espera que el primero tenga menor energía (más estabilidad) sin embargo, la estabilidad de los OM aumenta de la siguiente manera:

$$\sigma_{1s} < \sigma^*_{1s} < \sigma_{2s} < \sigma^*_{2s} < \pi_{2py} = \pi_{2pz} < \sigma_{2px} < \pi^*_{2py} = \pi^*_{2pz} < \sigma^*_{2px}$$

La inversión del orbital  $\sigma_{2px}$  con  $\pi_{2py}$  y  $\pi_{2pz}$  puede explicarse por la repulsión de  $\sigma_{2px}$  por los electrones en los OM sigma llenos  $\sigma_{1s}$ ,  $\sigma^*_{1s}$ ,  $\sigma_{2s}$ , y  $\sigma^*_{2s}$ , ya que todos estos OM se concentran en la misma zona de energía. Esta repulsión disminuye de izquierda a derecha en el segundo periodo,

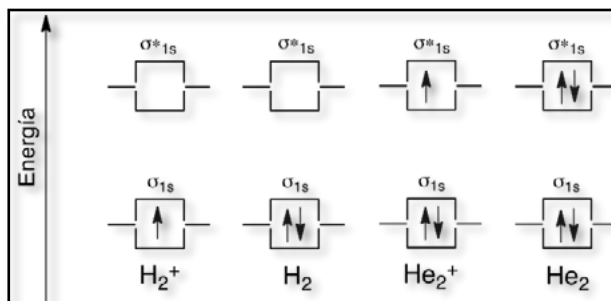


Figura 5.8. Niveles energéticos de orbitales moleculares de enlace y antienlace para  $H_2^+$ ,  $H_2$ ,  $He_2^+$  y  $He_2$ . En todos los casos los OM se forman por la interacción de dos orbitales  $1s$ .



por lo que en los casos de  $O_2$  y  $F_2$  el OM  $\sigma_{2px}$  tiene menor energía que  $\pi_{2py}$  y  $\pi_{2pz}$ . A continuación, se muestra el diagrama de OM para la molécula de  $C_2$  (Figura 5.9):

La configuración electrónica del átomo de carbono es  $1s^2 2s^2 2p^2$ , por lo que la molécula de carbono diatómico tiene doce electrones. De esta manera, la configuración electrónica del  $C_2$  es;  $(\sigma_{1s})^2(\sigma_{1s}^*)^2(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2py})^2(\pi_{2pz})^2$ . El orden de enlace es 2 y al no tener electrones desapareados es diamagnética.

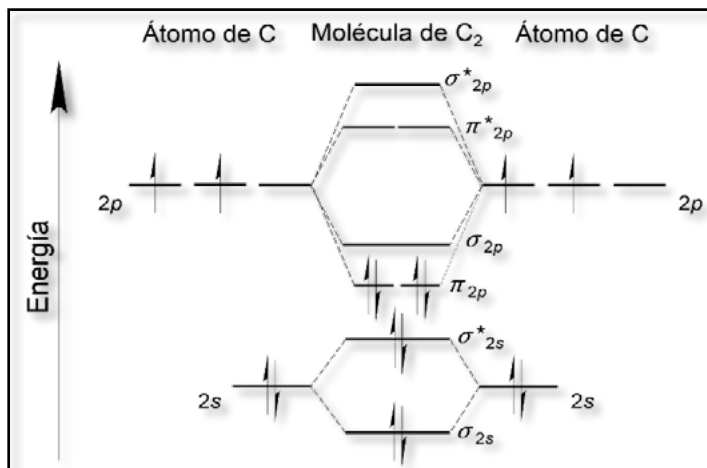


Figura 5.9. Diagrama general de OM para moléculas diatómicas homonucleares del segundo periodo  $Li_2$ ,  $Be_2$ ,  $B_2$ ,  $C_2$ , y  $N_2$ . Para efectos prácticos, se han omitido los orbitales  $\sigma_{1s}$ .

### 5.2.5.3 Moléculas diatómicas heteronucleares

Para llevar a cabo la descripción de moléculas diatómicas formadas por diferentes átomos es necesario tomar en cuenta el hecho de que diferentes tipos de átomos tienen capacidad diferente para atraer electrones. Por ejemplo, el potencial de ionización (la facilidad para ceder electrones) del flúor es mucho mayor que en el caso del litio. Del mismo modo la afinidad electrónica (capacidad para aceptar electrones) del flúor es fuertemente exotérmica, mientras que para el litio es mucho menor. El enlace entre el Li y el F es predominantemente iónico, consistiendo en la transferencia de densidad electrónica del litio hacia el flúor. Las propiedades del hidrógeno, por ejemplo, son intermedias, ya que cuando el Li se enlaza con el H, el hidrógeno acepta densidad electrónica del litio. Mientras que cuando el H se enlaza al F cede densidad electrónica al F. Las especies  $LiH$ ,  $HF$  y  $LiF$  tienen una naturaleza polar. El tratamiento de los enlaces heteronucleares se realiza considerando el concepto de electronegatividad. En las secciones previas se había asumido que los OA participantes en la generación de OM tenían la misma energía, lo que se cumple para moléculas diatómicas homonucleares. Sin embargo, los enlaces para moléculas diatómicas heteronucleares se llevarán a cabo entre átomos con orbitales de diferentes energías. Los OM enlazantes serán más estables en presencia del núcleo de un átomo con mayor atracción (mayor electronegatividad), por lo que dichos OM tendrán menor energía y los electrones que ocupen estos orbitales se encontrarán más cerca del núcleo del átomo más electronegativo.

Considere que la molécula de monóxido de carbono ( $CO$ ): el oxígeno es más electronegativo que el carbono, por lo que los electrones de los OM enlazantes son más estables si se encuentran más cerca de la región de los OA del átomo de oxígeno (la simetría de los OM enlazantes se parecen más al oxígeno). De manera opuesta, los OA del átomo de carbono participan más para los OM antienlazantes (la simetría de los OM antienlazantes se parecen más al C), tal como se muestra en la Figura 5.10.

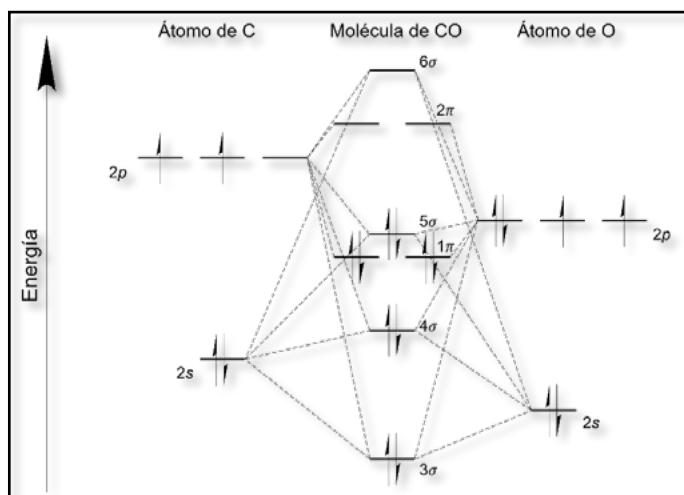


Figura 5.10. Diagrama de energía para OM de monóxido de carbono. Nótese que, en la formación de enlace, los electrones ocupan los orbitales que se parecen más a los OA del oxígeno. Es importante destacar que los OM  $1\sigma$  y  $3\sigma$  son esencialmente de no enlace. El orden de enlace para el CO es de tres.

**PROBLEMA TIPO:**

El  $N_2$  es transparente a la radiación infrarroja y visible debido a que es una molécula homonuclear y no tiene momento dipolar (diamagnética). Sin embargo, ocurre una absorción significativa en la longitud de onda del ultravioleta (UV), cerca de 100 nm, razón por la cual los láseres de  $N_2$  puro emiten luz verde en el intervalo del UV. Conteste lo siguiente: a) Obtenga la configuración electrónica del  $N_2$ ; b) el orden de enlace; c) las propiedades magnéticas; d) compare la longitud de enlace con la especie  $N_2^+$ .

Solución:

a) El átomo de nitrógeno (N) tiene una configuración electrónica de:  $1s^2 2s^2 2p^3$  por lo que el  $N_2$  cuenta con 14 electrones y la configuración de sus OM es:  $(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\sigma_{2px})^2$

b)

$$O.E. = \frac{1}{2} (\#e^- \text{ en OM enlazantes} - \#e^- \text{ en OM antienlazantes})$$

$$O.E. = \frac{1}{2} (10 - 6) = 2.0$$

c) Las moléculas con electrones desapareados poseen propiedades paramagnéticas. Mientras que las moléculas con todos sus electrones apareados son diamagnéticas. Por lo que la molécula de  $N_2$  es diamagnética

d) El  $N_2$  cuenta con 14 electrones y es diamagnética. Mientras que, el  $N_2^+$  cuenta con 13 electrones y es paramagnética. Adicionalmente el OE de enlace es menor al del  $N_2$ , lo que quiere decir que el enlace es menos estable y por tanto más largo.





**PROBLEMA TIPO:**

La fabricación de acero consume el 55% de O<sub>2</sub> producido comercialmente. En este proceso el O<sub>2</sub> es inyectado a alta presión en un molde de hierro a temperaturas de hasta 1700 °C para eliminar impurezas de azufre y carbono. Prediga las siguientes propiedades para el O<sub>2</sub>: a) configuración electrónica; b) orden de enlace; c) carácter magnético.

Solución:

a)  $(\sigma_{1s})^2(\sigma^*_{1s})^2(\sigma_{2s})^2(\sigma^*_{2s})^2(\pi_{2py})^2(\pi_{2pz})^2(\sigma_{2px})^2(\pi^*_{2py})(\pi^*_{2pz})$

b)  $O.E. = \frac{1}{2}(\#e^- \text{ en OM enlazantes} - \#e^- \text{ en OM antienlazantes})$

$$O.E. = \frac{1}{2}(10 - 4) = 3$$

c) Paramagnético.

**PROBLEMA TIPO:**

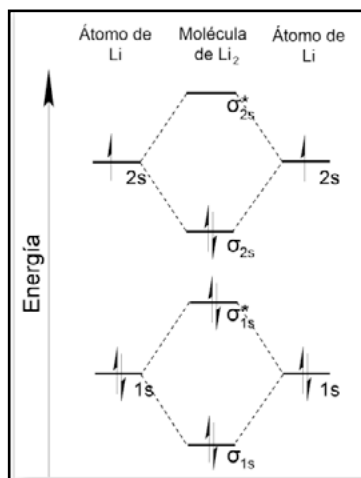
El torpedo Mark 50 es súper ligero y fue desarrollado por la marina de E.U.A, para ser utilizado contra submarinos rápidos y para grandes profundidades. El sistema de propulsión utiliza un tanque de hexafluoruro de azufre que es rociado sobre un bloque de litio sólido (Se genera LiF). La reacción genera vapor que proyecta al torpedo en un ciclo de Rankine cerrado.

Investigue y conteste lo siguiente:

- a) ¿Cuál es el diagrama de orbitales moleculares para la molécula de Li<sub>2</sub>?
- b) ¿Cuál es el diagrama de orbitales moleculares para la especie de LiF?
- c) Diga si el LiF es una molécula diamagnética (todos los electrones están apareados) o paramagnética (hay electrones desapareados)

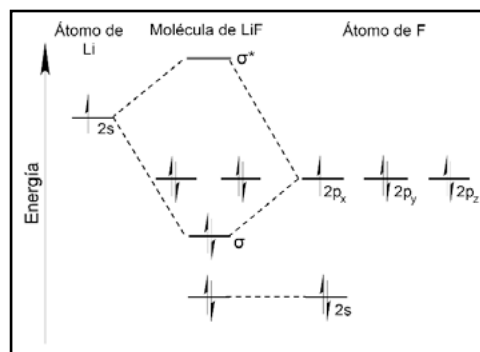
Solución:

a)





b)



c) Es una molécula diamagnética

### PROBLEMA TIPO:

La halita o sal de roca ( $\text{NaCl}$ ) es un mineral sedimentario que se obtiene por evaporación de agua de mar y algunos lagos; también se encuentra en sublimados volcánicos, depósitos de cuevas y cuencas.

Diga qué tipo de compuesto químico es la halita (ej. apolar, polar, iónico), y describa como es el diagrama de OM

*Solución:*

Es un compuesto iónico y su diagrama de OM se lleva a cabo entre átomos diferentes ( $\text{Na}^+$  y  $\text{Cl}^-$ ), los cuales tienen energía diferente. Los OM de enlace se encuentran más cerca del átomo más electronegativo (el  $\text{Cl}^-$ ) y por tanto se parecen más a éste. Mientras que los OM de antienlace son más parecidos a los OA del  $\text{Na}^+$ .

## 5.3 Enlace metálico

### 5.3.1 Definición de metal

El concepto de metal se refiere tanto a elementos puros como a aleaciones con características metálicas, como el acero y el bronce. Entre sus propiedades se encuentra la capacidad para conducir calor y electricidad, electronegatividad y energía de ionización bajas (pérdida fácil de electrones que da lugar a cationes). Los metales poseen alta densidad y son sólidos a temperatura ambiente (con excepción del mercurio). Además, sus propiedades físicas incluyen brillo (refleja la luz), tenacidad, resistencia mecánica, maleabilidad y ductilidad. Por ejemplo, los metales maleables pueden ser empleados para formar hojas (papel aluminio), mientras que los metales dúctiles son empleados para formar alambres (cobre).



### 5.3.2 Cristales metálicos y empaquetamiento de esferas

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

Generalmente, los metales son materiales sólidos que presentan una forma definida y tienen una estructura cristalina. Esto es los átomos metálicos que componen a la estructura cristalina están acomodados en forma ordenada y tienen un patrón de empaquetamiento definido.

En la naturaleza, muchas estructuras cristalinas están basadas en el empaquetamiento compacto, es decir, la disposición de un número infinito de celdas de esferas de forma que éstas ocupen la mayor fracción posible de un espacio infinito tridimensional, en el apéndice A se encuentran ilustradas todas las estructuras cristalinas y sus características. Por lo general, los cristales metálicos son cúbicos centrados en el cuerpo (bcc), cúbicos centrados en las caras (fcc) o hexagonales de empaquetamiento compacto (hcp) (Ver Figuras 5.11 y 5.12.)

Existen diferentes tipos de estructuras cristalinas para un mismo metal. Por ejemplo, el hierro (Fe) tiene una estructura cúbica centrada en el cuerpo (bcc) a una temperatura por debajo de 912 °C y una estructura cúbica centrada en las caras entre 912 – 1394 °C. Otras excepciones se presentan en el caso del manganeso (Mn) con una estructura cúbica centrada en el cuerpo, el galio (Ga) con estructura ortorrómbica centrada en las bases. Mientras que el indio (In) y el estaño (Sn) tienen una estructura tetragonal centrada en el cuerpo y el mercurio (Hg) romboédrica.

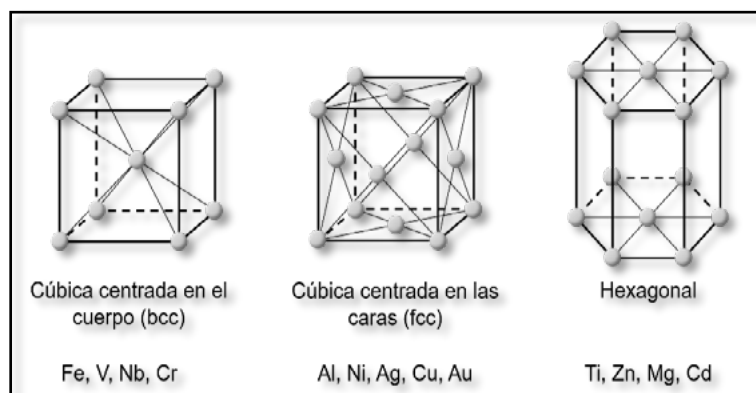


Figura 5.11. Ejemplos de celdas cristalinas: cúbica centrada en el cuerpo, cúbica centrada en las caras y hexagonal.

1	2	hcp Hexagonal compacta		bcc Cúbica centrada en el cuerpo								13	14
3 Li 6.94	4 Be 9.01	fcc Cúbica centrada en las caras		otra Otra estructura (ver texto)								13 Al 26.98	
11 Na 22.99	12 Mg 24.30	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12		
19 K 39.10	20 Ca 40.08	21 Sc 44.96	22 Ti 47.88	23 V 50.94	24 Cr 51.99	25 Mn 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.93	28 Ni 58.69	29 Cu 63.55	30 Zn 65.39	31 Ga 69.72	
37 Rb 85.47	38 Sr 97.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc 97.91	44 Ru 101.1	45 Rh 102.9	46 Pd 106.4	47 Ag 107.9	48 Cd 112.4	49 In 114.8	50 Sn 119.7
52 Cs 132.9	56 Ba 137.3	57 La 138.9	72 Hf 178.5	73 Ta 180.9	74 W 183.8	75 Re 186.2	76 Os 190.2	77 Ir 192.2	78 Pt 195.1	79 Au 196.9	80 Hg 200.6	81 Tl 204.4	82 Pb 207.2

Figura 5.12. Estructuras cristalinas de metales. Los metales se muestran en sus posiciones de la tabla periódica.



### 5.3.3 Esquema de Arkel-Ketelaar

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

El 1941, el químico holandés Anton Eduard van Arkel, propuso un diagrama triangular cualitativo para representar la transición progresiva entre los tres casos limitantes de enlace iónico, covalente y metálico. Arkel predijo la ubicación de cada compuesto basado en la estimación de su carácter iónico y metálico relativo en las esquinas del triángulo. Posteriormente, en 1947, Jan Arnold Albert Ketelaar enriquece el uso del triángulo propuesto por Arkel. Como puede observarse en la Figura 5.13, en cada uno de los extremos de este triángulo se colocan compuestos con electronegatividad variable, esto es, iónicos (gran diferencia de electronegatividad entre átomos que componen al compuesto), covalentes (nula o poca diferencia de electronegatividad entre átomos) y metálicos (orbitales enlazantes deslocalizados).

De hecho, puede apreciarse que los diferentes compuestos no presentan enlaces particulares de un tipo específico, sino que dichos enlaces están interconectados y tienen grados variables de diferentes enlaces. Por ejemplo, un enlace covalente con un carácter iónico significativo es denominado *enlace covalente polar*.

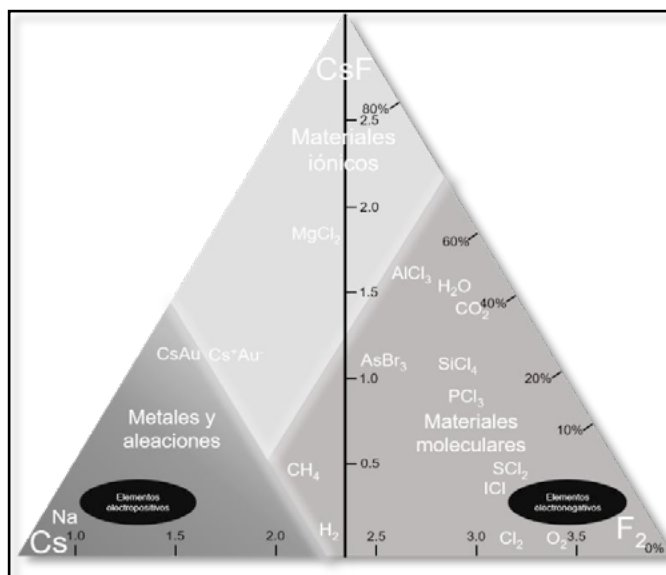


Figura 5.13. Versión "moderna" del triángulo de Arkel-Ketelaar.

El análisis cuantitativo para determinar la naturaleza del enlace incluye la determinación del parámetro de ionicidad (I), el cual se define como la diferencia de electronegatividades de dos elementos, A y B, en un compuesto binario,  $A_aB_b$ , sin importar la estequiometría (Jensen 1995).

$$I = \Delta EN = (EN_B - EN_A)$$

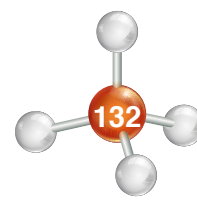
Adicionalmente, el parámetro de covalencia (C) está definido como el promedio de las electronegatividades de dos elementos, A y B, en un compuesto binario,  $A_aB_b$ , sin importar la estequiometría (Jensen 1995).

$$C = EN_{prom} = \frac{(EN_B + EN_A)}{2}$$

Para el caso de un enlace metálico, los parámetros de ionicidad y covalencia son pequeños, ya que las electronegatividades tanto de A como de B ( $EN_A$  y  $EN_B$ ) son bajas (ver Tabla 5.1). Los metales también suelen ser denominados como electropositivos.

Tipo de Enlace	Combinación Electronegatividades	P. Ionicidad (I)	P. Covalencia (C)
Metálico	$EN_A$ baja + $EN_B$ baja	Pequeño	Pequeño
Covalente	$EN_A$ alta + $EN_B$ alta	Pequeño	Grande
Iónico	$EN_A$ baja + $EN_B$ alta	Grande	Intermedio

Tabla 5.1. Combinación de electronegatividades para diferentes tipos de enlace.





Sproul realizó la clasificación de más de 300 compuestos y observó que el triángulo podía ser dividido en compuestos covalentes, metálicos y iónicos, por líneas rectas-paralelas a las esquinas de iónico-metálico y covalente-iónico del triángulo (Figura 5.13). Estas divisiones no son rígidas ni fijas ya que la mayoría de los compuestos exhiben un comportamiento mixto, es decir, contribuciones de dos tipos de enlace. En el caso específico de los enlaces metálicos, es difícil establecer una frontera entre metales y no-metales ya que hay pocos compuestos binarios con características metálicas. Sin embargo, existen los metaloides, los cuales se encuentran entre las líneas curvas del triángulo de la Figura 5.14 y funcionan como una transición suave entre los metales y no-metales.

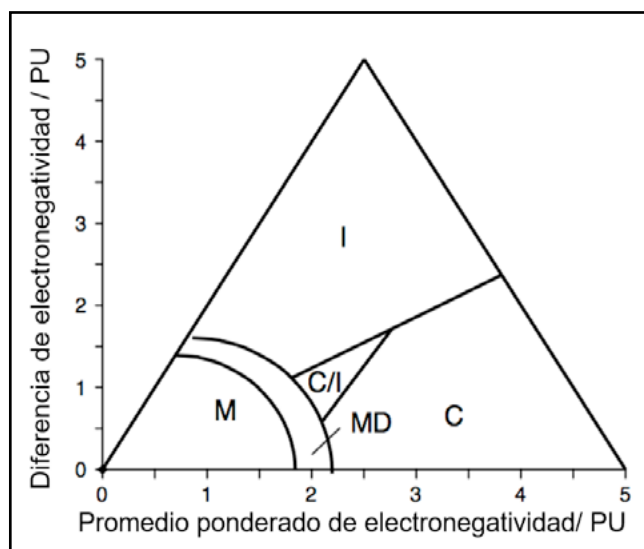


Figura 5.14. Triángulo con fronteras, definidas por Meek y Garner (2005). M = metal; I = iónico; MD = metaloides; C/I = covalente/iónico y C = covalente.

### 5.3.4 Modelo de mar de electrones

Existe un número limitado de compuestos con características puramente metálicas, de hecho, con el empleo del concepto de *electronegatividad* se ha encontrado que existen muchos compuestos con contribuciones de dos tipos de enlace.

Frecuentemente, el enlace metálico (compuestos metálicos) es descrito como un enlace deslocalizado debido a sus propiedades conductoras. Mientras que los compuestos aislantes son descritos a partir de enlaces localizados. En el caso particular del sodio (Na), éste presenta una configuración electrónica  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ . Cuando los átomos de sodio forman el enlace metálico, los electrones de los orbitales atómicos  $3s$  serán compartidos entre los átomos vecinos para formar orbitales moleculares del mismo modo que sucede en la formación de enlaces covalentes.

La diferencia radica en que el sodio metálico exhibe una estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo (Figura 5.11) y, por lo tanto, cada átomo de sodio tiene 8 átomos de sodio vecinos con los que interactúa (los orbitales atómicos  $3s$  participan en esta interacción), y a su vez, cada uno de esos 8 átomos vecinos interactúa con otros 8 átomos de sodio, y así sucesivamente. De esta manera, se forma un gran número de orbitales moleculares (OM) que se encuentran conectados por la interacción de todos los átomos metálicos que conforman la red cristalina metálica.

A pesar del gran número de OM sigma ( $\sigma$ ) obtenidos, sólo es posible acomodar hasta dos electrones en dicho orbital. Según lo anterior, los electrones pueden moverse "libremente" entre los diferentes OM formados por diferentes átomos, por lo que se afirma que los electrones de un enlace metálico están deslocalizados. Frecuentemente, esto se describe en algunos textos de química como un arreglo de iones positivos en un mar de electrones (Figura 5.15).

A pesar de que la teoría de bandas describe satisfactoriamente el mecanismo de conducción eléctrica y actualmente es aceptado como el modelo teórico para describir la conducción eléctrica,





no es capaz de describir físicamente la estructura de los metales. Aún es común describir a las estructuras metálicas y el enlace metálico como enlaces que involucran la deslocalización de electrones a través de un metal sólido, o bien, como núcleos metálicos catiónicos (cargados positivamente) en un mar de electrones. Sin embargo, se ha demostrado que dichos modelos son inadecuados para la descripción de la estructura metálica y sus propiedades, por lo que es necesario contar con un modelo que explique la estructura física y las propiedades y reacciones de los metales que no sean descritas por la teoría de bandas.

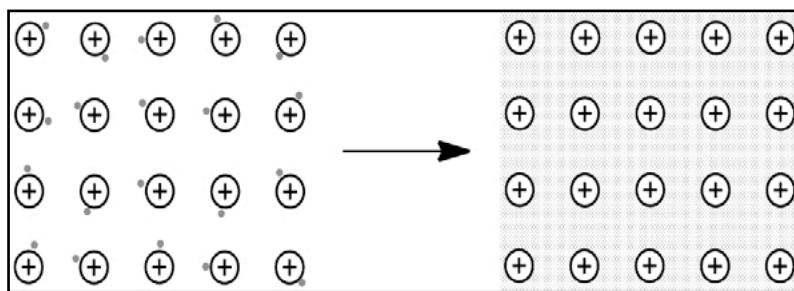


Figura 5.15. Representación gráfica del enlace metálico. Los electrones de los orbitales más externos se encuentran “libres” (izquierda), dando lugar a la formación de iones positivos. Los electrones pueden moverse entre los diferentes iones positivos (deslocalización) formando un “mar de electrones”.

### 5.3.5 Modelo de esfera-suave

Este modelo considera a los átomos y iones como esferas compresibles. Originalmente se utilizó este modelo para calcular distancias internucleares de compuestos iónicos. Posteriormente, su uso se extendió a los cristales (o compuestos) metálicos. En el caso de los cristales metálicos, los electrones de los orbitales más externos de cada átomo no se encuentran completamente libres o deslocalizados, sino que se encuentran parcialmente separados del átomo metálico, lo que da lugar a la formación de un “ion positivo” con uno o más electrones separados, donde los electrones se comportan como “iones negativos”.

Los electrones separados (iones negativos) pueden ocupar ciertas posiciones equivalentes que se encuentran en el punto medio entre los átomos vecinos de los “iones positivos” pero pueden moverse a otros puntos medios en la celda unitaria de la estructura cristalina del metal en cuestión.

Algunas de las propiedades que presentan los metales pueden ser mejor explicadas a través de la **teoría de esferas suaves**. Por ejemplo, cuando un metal es doblado o torcido, los electrones pueden moverse de un sitio a otro en la celda unitaria, permitiendo que la forma del metal cambie sin que se rompa ningún enlace. Este es el caso del sodio, el cual, cuando se encuentra bajo mucha presión incrementa su resistencia drásticamente y actúa más como un aislante que como conductor. Esto reduce en volumen el número de sitios ocupados por los electrones separados. Además, la distancia de algunos puntos medios puede incrementarse a tal grado que los electrones no puedan moverse de un sitio a otro. Por lo tanto, si no hay sitios vacantes que faciliten el movimiento de electrones o si los electrones no pueden moverse entre los sitios de las celdas unitarias vecinas, el metal se vuelve, virtualmente, un material aislante.

Los iones negativos pueden moverse alrededor de diferentes puntos medios dentro de la celda unitaria (ver definición de celda unitaria en la sección 5.6 de este capítulo); sólo algunos de esos sitios están ocupados en algún momento. Debido a que todas las celdas unitarias en un metal son idénticas, los sitios vacantes existentes facilitan el movimiento de electrones. Una diferencia de potencial pequeña en los extremos de una tira o alambre metálica(o) puede vencer la atracción electrostática entre iones positivos y los electrones separados para generar un flujo de electrones a través del alambre (ej. corriente eléctrica). De esta manera, la resistencia eléctrica puede



entenderse como la energía necesaria para que los electrones separados pasen de un punto vacante en la celda unitaria a otra celda unitaria.

Los metales son buenos conductores de calor y sonido debido a su densidad, su ordenamiento regular y la cercanía de partículas vecinas, las cuales permiten que la energía y el sonido pasen rápidamente de una partícula a otra en todas las direcciones, más que un “mar de electrones”.

Fishbane et al., han sugerido que el número de electrones separados (o libres) en un metal se encuentra en un intervalo de 1 a 3.5 electrones por átomo, mientras que los cálculos obtenidos por Girifalco han mostrado que solo un porcentaje pequeño de electrones en un metal están separados. Este evento puede ser explicado fácilmente con el modelo de esfera-suave. Existe un número limitado de sitios que los electrones separados pueden ocupar. Por ejemplo, para una estructura cúbica centrada en el cuerpo existen ocho puntos medios disponibles para los electrones separados. Debido a que hay dos átomos por cada celda unitaria el número máximo de electrones separados que ocupen los puntos medios es de cuatro.

### PROBLEMA TIPO.

El magnesio (Mg) es el séptimo elemento más abundante en la corteza terrestre y el tercero más abundante disuelto en el agua de mar. Sin embargo, el Mg no se encuentra como metal libre sino en minerales, como la dolomita ( $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$ ), la cual es un componente importante de formaciones kársticas.

Una forma de obtener el Mg libre es a través de la electrólisis de cloruro de magnesio ( $\text{MgCl}_2$ ), proveniente de salmueras y agua de mar. El magnesio libre tiene una configuración electrónica  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ . La estructura cristalina del magnesio metálico es hexagonal. El Mg presenta enlaces más fuertes y punto de fusión más alto que el sodio (Na). Explique a través de la teoría de mar de electrones y de esfera suave estas propiedades.

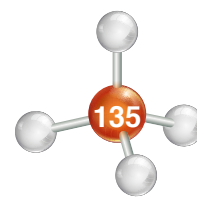
*Solución:*

*El magnesio tiene dos electrones en su nivel de energía más externo ( $3s^2$ ). Ambos electrones están deslocalizados, por lo que la densidad del “mar de electrones” del Mg tiene el doble de densidad que el Na. Los iones positivos resultantes tienen el doble de carga, entonces habrá mayor atracción entre iones y el “mar de electrones”.*

*Por otro lado, cada Mg tiene doce protones en el núcleo comparado con once protones del Na. En ambos casos el núcleo es “apantallado” por los electrones deslocalizados de los orbitales más internos ( $1s^2 2s^2 2p^6$ ), diez electrones en total. Lo que significa que el núcleo de Mg tiene el doble de electrones deslocalizados con respecto al Na. Adicionalmente, el Mg tiene un radio menor que el Na, por lo que los electrones deslocalizados se encuentran más cerca del núcleo en el caso del Mg. Adicionalmente, la estructura cristalina del magnesio tiene doce átomos de magnesio vecinos, mientras que el sodio sólo tiene ocho. Estos factores resultan en una mayor fuerza de enlace para el átomo de magnesio con respecto al sodio.*

## 5.4 Teoría de bandas

Los metales son conocidos por su capacidad para conducir electricidad. En la sección anterior fueron descritas algunas propiedades de los metales, por ejemplo, la capacidad para conducir el calor y la electricidad. Para comprender mejor las propiedades de conductividad de los metales es necesario aplicar la *teoría de bandas*, la cual establece que los electrones deslocalizados se





mueven con libertad a través de las bandas que se forman por el traslape de los orbitales moleculares. Esta teoría también explica el comportamiento de otros materiales, como los semiconductores y los aislantes.

Para explicar mejor el enlace y las propiedades de un arreglo infinito de átomos de un elemento metálico en un cristal, debemos primero examinar lo que sucede cuando un grupo pequeño de átomos metálicos interactúa. Por ejemplo, el átomo de litio (Li) tiene solo un electrón en la capa de valencia (OA de mayor energía),  $2s^1$ , y cuando dos OA (orbitales atómicos) interactúan, el resultado es la formación de dos orbitales moleculares (OM): uno de enlace (baja energía) y otro de antienlace (alta energía). En el caso de un mol de Li metálico (considerado como una estructura 3-D infinita) que contiene  $6.022 \times 10^{23}$  átomos (número de Avogadro ( $N$ )) de Li, la interacción de todos los átomos de Li da lugar a la formación de  $N$  niveles deslocalizados de energía muy próximos entre sí, tanto, que parecieran *bandas*. Conforme se incrementa el número de OM que participan en el enlace, el promedio de energía de la banda de entre los OM adyacentes disminuye (Figura 5.16). De igual manera, la energía de banda entre los OM de enlace y antienlace disminuye hasta alcanzar un continuo de niveles de energía. Para describir materiales infinitos en 3-D, no es apropiado referirse a cada nivel como *orbital molecular* sino como *niveles de energía*.

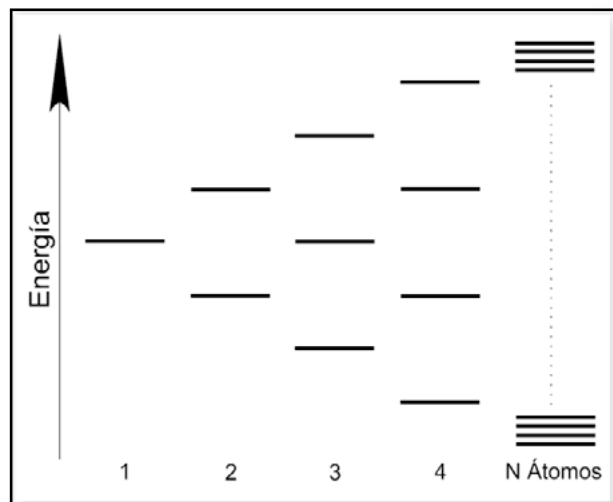


Figura 5.16. Desdoblamiento de niveles de energía de acuerdo con la Teoría de Orbitales Moleculares (TOM).

En el litio metálico desaparecen los orbitales atómicos y se forman orbitales moleculares con energías muy parecidas, tan próximas entre ellas que todos los OM en conjunto ocupan lo que se denomina una “**banda de energía**”.

Aunque los electrones van llenando los orbitales moleculares en orden creciente de energía, éstos son tan próximos que pueden ocupar cualquier posición dentro de la banda. La banda ocupada por los orbitales moleculares con los electrones de valencia se llama *banda de valencia*, mientras que la banda formada por los orbitales moleculares vacíos se llama *banda de conducción*. A veces, ambas bandas se traslapan energéticamente hablando (Figura 5.17). Este modelo explica claramente el comportamiento eléctrico no sólo de las sustancias conductoras, sino también de las semiconductoras y las aislantes.

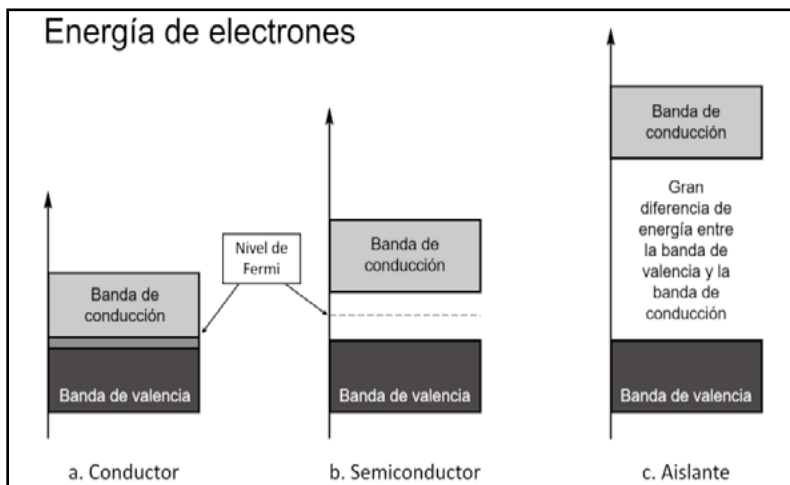


Figura 5.17. Representación de banda de valencia y banda de conducción para materiales conductores, semiconductores y aislantes.



Un parámetro importante en la *teoría de bandas* es el *nivel de Fermi*, el cual se localiza en el nivel de mayor energía ocupado a la temperatura del cero absoluto (0 K). Esta energía sirve para entender el comportamiento de los electrones (partículas fermiónicas), los cuales no pueden ocupar de manera simultánea un mismo estado, de acuerdo con el Principio de exclusión de Pauli. De esta manera cuando un sistema posee varios electrones, estos ocupan niveles de energía mayores a medida que los niveles inferiores se llenan. La energía necesaria para remover un electrón del nivel de Fermi  $E_F$  y llevarlo hasta el vacío es conocida como la función trabajo ( $\phi$ ) y es análoga al potencial de ionización para átomos aislados (Figura 5.18) con relación a la banda de conducción, es un factor fundamental en la determinación de las propiedades eléctricas.

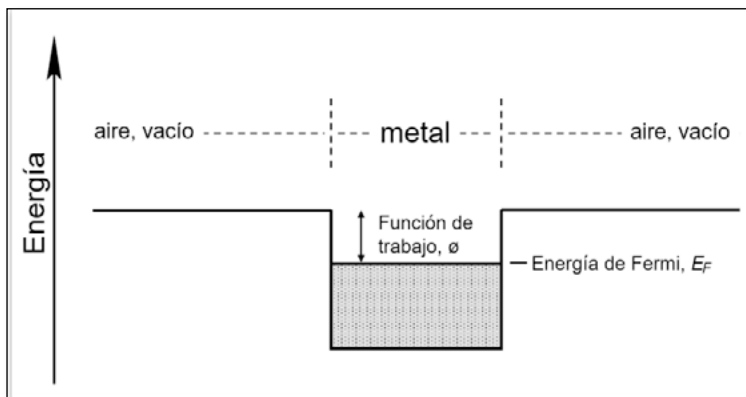


Figura 5.18. Teoría del electrón libre para un metal, electrones en un pozo de potencial.

### 5.4.1 Estructura de bandas de metales

Los metales y otras sustancias conductoras están caracterizados por una estructura de banda donde la de mayor energía se encuentra parcialmente llena. Los niveles ocupados de la banda de valencia se traslapan energéticamente con la banda de conducción que está vacía, disponiendo de niveles de energía vacíos que pueden ser ocupados con un mínimo aporte de energía, es decir, que los electrones están casi libres y, por tanto, conducen corriente eléctrica.

A temperaturas por arriba del cero absoluto, algunos electrones en niveles cercanos a  $E_F$  tienen energía térmica suficiente para ser promovidos hacia niveles por arriba de  $E_F$ . Por tanto, a temperaturas superiores a 0 K algunos niveles por arriba de  $E_F$  están ocupados y otros por debajo de  $E_F$  están vacantes.

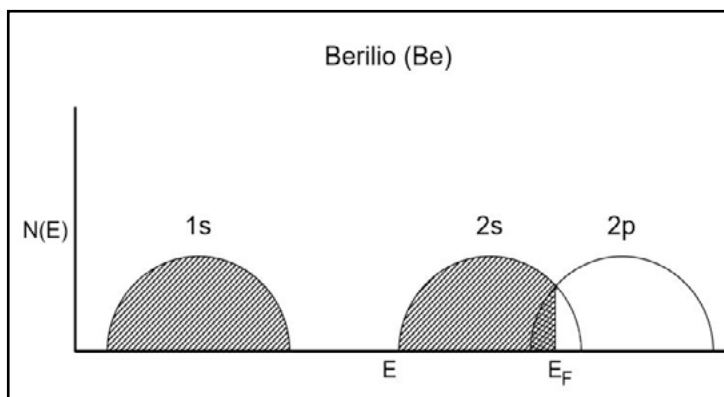


Figura 5.19. Traslape de las bandas del berilio (Be) metálico.

En algunos metales las bandas de energía se traslapan; dicho traslape es el responsable de las propiedades eléctricas de los metales. Por ejemplo, los metales alcalinotérreos. En el caso del berilio (Be), se traslapan las bandas 2s y 2p, las cuales se encuentran parcialmente llenas. Si estas bandas no se traslapan, la banda 2s estaría completamente llena, y la banda 2p vacía, por lo que el Berilio no sería metálico (Figura 5.19)

### 5.4.2 Estructura de bandas de aislantes y semiconductores

En los semiconductores y en los aislantes, la banda de valencia no se traslapa con la de conducción ya que hay una zona intermedia llamada *banda prohibida*.

En el caso de los aislantes, la banda de valencia se encuentra llena y está separada de la banda de conducción (que está vacía) por una banda prohibida muy grande. El diamante es un excelente





aislante con una banda prohibida de  $\approx 6$  eV. Muy pocos electrones tienen la energía térmica suficiente para ser promovidos a la banda vacía de arriba. Por tanto, la conductividad es despreciable en estos materiales.

Los semiconductores tienen una estructura similar a la de los aislantes; sin embargo, la banda prohibida no es tan grande. Usualmente tiene un valor entre 0.5 y 0.3 eV. Cualquier electrón que se ha promovido a una banda vacía de mayor energía (banda de conducción) es considerado como un portador de carga negativo. Los niveles con sitios electrónicos vacantes que se van quedando atrás se consideran como “hoyos” positivos.

## 5.5 Aislantes, semiconductores, conductores y superconductores

La mayor diferencia entre metales, semiconductores y aislantes radica en la magnitud de sus respectivas conductividades. Los metales conducen electricidad fácilmente ( $\sigma \approx 10^4 - 10^6$  ohm<sup>-1</sup>cm<sup>-1</sup>), mientras que la conductividad de los aislantes es muy pobre o nula ( $\sigma < 10^{-15}$  ohm<sup>-1</sup>cm<sup>-1</sup>). Los semiconductores yacen entre  $10^{-5} - 10^{-1}$  ohm<sup>-1</sup>cm<sup>-1</sup>. Las fronteras entre los tres tipos de materiales son un tanto arbitrarias por lo que existe cierto grado de traslape en la clasificación de estos materiales. Las características que hacen a los metales conductores se han descrito anteriormente, por lo que a continuación nos enfocaremos en materiales de naturaleza aislante, semiconductor y superconductora.

### 5.5.1 Aislantes

Los materiales aislantes no conducen significativamente la electricidad. Desde un punto de vista de bandas, los materiales aislantes tienen una banda de valencia llena, una banda prohibida grande y una banda de conducción vacía. Debido al tamaño de la banda prohibida, muy pocos electrones logran ser promovidos de la banda de valencia a la banda de conducción y, en consecuencia, su conductividad es muy pobre.

### 5.5.2 Semiconductores

Muchos compuestos orgánicos e inorgánicos son semiconductores. Los compuestos inorgánicos con propiedades semiconductoras más conocidos son los llamados de tipo III-V. Estos compuestos son combinaciones de elementos de los Grupos 13 y 15 (ej. GaAs y InSb, GaP). La mayoría de los semiconductores tipo III-V tienen una estructura de tipo blanda de zinc, la cual está fuertemente relacionada con la estructura del diamante.

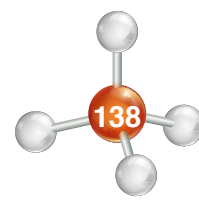
Para llevar a cabo la clasificación de los materiales en metales, semiconductores y aislantes deben considerarse tres factores:

- La estructura de banda de cada material.
- El llenado parcial o total de las bandas de valencia.
- La diferencia de energía entre las banda llenas y vacías; la magnitud de la banda prohibida.

Específicamente, existe una diferencia fundamental entre el mecanismo de conducción en metales y el mecanismo de conducción en semiconductores y aislantes. La conductividad de la mayoría de los semiconductores y aislantes se incrementa rápidamente con el aumento de temperatura, mientras que, en el caso de los metales, la conductividad tiende a mostrar un ligero decremento con la temperatura. La conductividad se expresa con la siguiente ecuación:

$$\sigma = ne\mu$$

donde  $n$  es el número (o densidad) de portadores de carga,  $e$  es la carga fundamental y  $\mu$  la movilidad de los portadores de carga. La dependencia de la temperatura de  $\sigma$  en diferentes







materiales puede entenderse mediante la consideración de los términos  $n$ ,  $e$  y  $\mu$ . Es notable que  $e$  es independiente de la temperatura  $y$ , por tanto, permanece constante, mientras que el término de  $\mu$  decrece ligeramente con el incremento de temperatura debido al aumento de las vibraciones en la red. La principal contribución en el comportamiento de materiales yace en el valor de  $n$  y su dependencia con la temperatura como se explica a continuación:

- Para materiales conductores,  $n$  es grande y prácticamente no cambia con la temperatura.
- Para semiconductores y aislantes,  $n$  se incrementa exponencialmente con la temperatura  $y$ , por tanto, el valor de  $\sigma$  incrementa. En algunos casos existen aislantes que se comportan como semiconductores a temperaturas elevadas, mientras que, a temperaturas muy bajas, algunos semiconductores se comportan como aislantes.

Los semiconductores se dividen en intrínsecos (elementales) y extrínsecos (compuestos).

- Semiconductores elementales o intrínsecos:** Están constituidos por materiales puros, cuyas estructuras de bandas pueden ser representadas según la Figura 5.20. Para este tipo de semiconductores, el número de electrones en la banda de conducción está gobernado por la diferencia en energía de las bandas y por la temperatura. Los elementos como el silicio (Si) y el germanio (Ge) son ejemplos clásicos de semiconductores elementales. Éstos se encuentran en el Grupo 14 de la Tabla Periódica. Con el incremento de la masa atómica en el grupo, los elementos cambian sus propiedades y pasan de

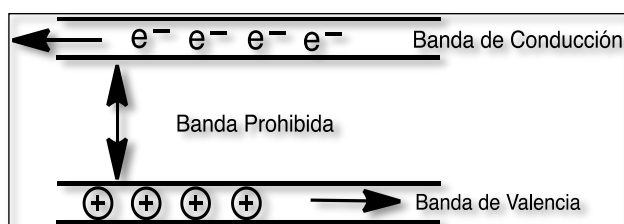


Figura 5.20. Portadores de carga positiva y negativa

aislantes, en el caso del carbono (forma alotrópica del diamante), a semiconductores (silicio, germanio y estaño gris) y hasta a metales conductores, como es el caso del estaño blanco y del plomo (Tabla 5.2). Todos los elementos de este grupo, con excepción del estaño y plomo, presentan una estructura de tipo diamante.

aislantes, en el caso del carbono (forma alotrópica del diamante), a semiconductores (silicio, germanio y estaño gris) y hasta a metales conductores, como es el caso del estaño blanco y del plomo (Tabla 5.2). Todos los elementos de este grupo, con excepción del estaño y plomo, presentan una estructura de tipo diamante.

Elemento	Banda Prohibida (eV)	Tipo de Material
<b>C (diamante)</b>	6.0	Aislante
<b>Si</b>	1.1	Semiconductor
<b>Ge</b>	0.7	Semiconductor
<b>Sn (gris; &gt; 13 °C)</b>	0.1	Semiconductor
<b>Sn (blanco; &lt; 13 °C)</b>	0	Metal
<b>Pb</b>	0	Metal

Tabla 5.2. Bandas prohibidas de los elementos del Grupo 14.

La estructura de bandas para los elementos del Grupo 14 es muy diferente a lo que se espera para el sodio (Na) o el magnesio (Mg), donde los niveles 3s y 3p se traslapan para dar lugar a dos bandas anchas parcialmente llenas.

- Semiconductores compuestos o extrínsecos:** Son materiales cuya conductividad está controlada por la adición de dopantes. Por ejemplo, el Si puede convertirse en un semiconductor extrínseco si se emplean elementos del Grupo 13 o 15 como dopantes (Figura 5.21 y 5.22). Utilizando la teoría de bandas, se explica que el nivel de energía asociado con cada enlace electrónico sencillo Ga-Si no forma parte de la banda de valencia

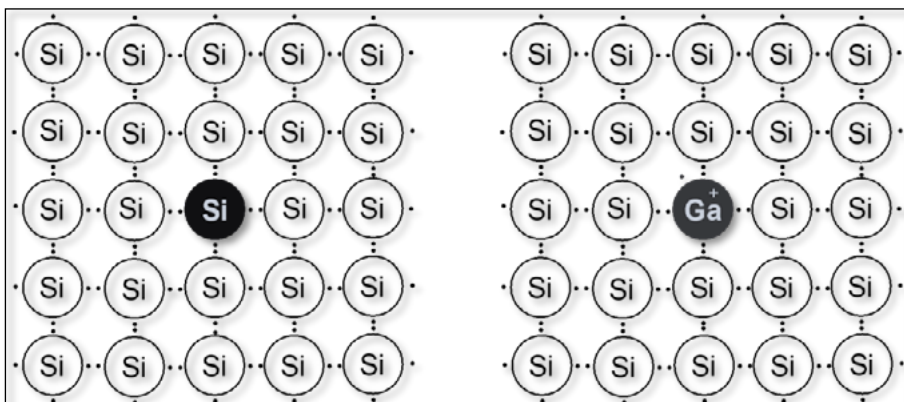


Figura 5.21. Representación de un cristal de Si sin dopar (izquierda) y uno dopado con Ga (derecha) en un material semiconductor.

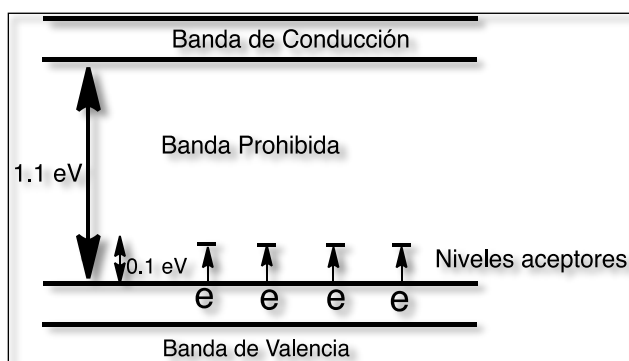


Figura 5.22. Esquema de semiconductividad de tipo-p.

del Si. De hecho, se forma un nivel discreto justo por arriba de la banda de valencia. Este nivel es conocido como un nivel aceptor porque tiene justo la capacidad de aceptar electrones.

Esto permite que los electrones tengan mayor capacidad para

ser promovidos desde la banda de valencia hasta la banda conductora, disminuyendo así el tamaño de la banda prohibida y, por ende, aumentando la conductividad eléctrica. Los electrones del nivel aceptor no participan en las propiedades de conductividad. Los cambios en la temperatura y la concentración de galio determinan las características intrínsecas o extrínsecas de este tipo de superconductores. Por ejemplo, a temperaturas "bajas" y mayor

concentración de galio, el semiconductor se comportará como extrínseco, mientras que, a concentraciones bajas de galio y temperaturas elevadas, el material se comporta como intrínseco.

Consideremos ahora el dopaje de Si con arsénico (As), que es un elemento pentavalente (Figura 5.23). De manera análoga al galio, los átomos de arsénico substituyen a uno de silicio dentro de la red cristalina, pero ahora, por cada átomo de arsénico, hay un electrón más de lo necesario para formar cuatro enlaces covalentes As-Si. Esto genera un electrón extra que ocupa un nivel discreto, ligeramente debajo de la banda de conducción. Aunque los electrones en este nivel no son suficientes para "bajar" la banda de conducción, pueden actuar como donadores porque estos electrones tienen suficiente energía térmica como para ser promovidos a la banda de conducción, donde son libres para moverse y, por lo tanto, son capaces de contribuir a la conductividad eléctrica del material.

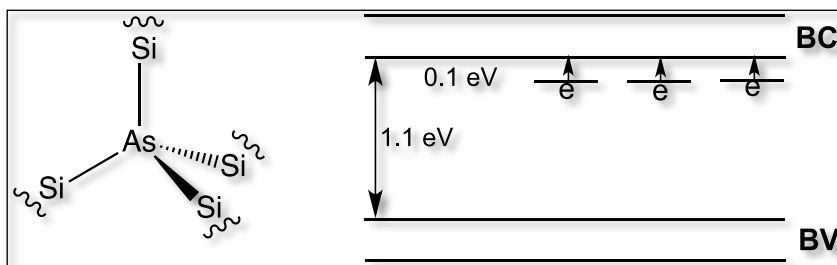


Figura 5.23. Esquema de semiconductividad tipo-n. Las líneas curvas representan una continuidad.

Las principales diferencias entre los semiconductores intrínsecos y los extrínsecos son:

- a) Los semiconductores extrínsecos tienen conductividades eléctricas mucho más altas que un semiconductor intrínseco semejante a la misma temperatura. Por ejemplo, a 25 °C, el



silicio puro tiene una conductividad de aproximadamente  $10^{-2} \text{ ohm}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ . Mientras que, si es dopado correctamente, puede llegar a valores de conductividad de hasta  $10^5 \text{ ohm}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ .

- b) La conductividad en semiconductores extrínsecos puede ser controlada con mucha precisión mediante la variación de la concentración de los agentes dopantes. De esta manera, es como materiales con valores de conductividad específica pueden ser diseñados y fabricados. Los semiconductores intrínsecos no permiten hacer esto: su conductividad depende, primordialmente, de la naturaleza del material y de la temperatura.

Los semiconductores tienen un importante uso tecnológico en la vida cotidiana. Son, por ejemplo, elemento básico de los transistores y procesadores, así como de diversos aparatos electrónicos. También son empleados en otras importantes tecnologías como las celdas solares.

#### PROBLEMA TIPO:

El GaAs y otros semiconductores relacionados como el InP y el GaN son predominantes en aplicaciones optoelectrónicas, tales como dispositivos emisores de luz (*LEDs* por sus siglas en inglés) y láseres semiconductores. Su estructura cristalina es, prácticamente, análoga a la del silicio.

Cuando es necesario dopar el GaAs se usan elementos del grupo VI como azufre (S) o del grupo II, como el zinc (Zn). En cada uno de los casos anteriores (S y Zn) ¿Qué átomo reemplazarían el S y el Zn? ¿Qué tipo de semiconductor (p o n) resultaría de cada caso?

*Solución:*

*Los elementos del grupo VI pueden reemplazar fácilmente elementos del grupo V (como As) y funcionar como donadores (semiconductor tipo n), mientras que elementos del grupo II pueden substituir elementos del grupo III (como Ga) y servir como aceptores (semiconductor tipo p).*

### 5.5.3 Superconductores

La superconductividad es un estado de la materia en el que, al reducir la temperatura por debajo de una temperatura crítica ( $T_c$ ), la resistividad eléctrica disminuye abruptamente hasta cero.

Normalmente la resistividad eléctrica de los conductores metálicos disminuye gradualmente al reducir la temperatura; sin embargo, los conductores siguen presentando valores observables de resistividad incluso a 0 K. Los materiales en estado superconductor conducen la electricidad sin resistencia o pérdida de energía.

Este fenómeno fue descubierto por el físico danés Heike Kamerlingh Onnes en 1911. Desde su descubrimiento, se ha encontrado que muchos elementos (Figura 5.24) y miles de otros compuestos han mostrado tener propiedades superconductoras a muy bajas temperaturas.

Las propiedades de los materiales en estado superconductor pueden parecer bastante extrañas y, de hecho, son difíciles de describir y entender desde un punto de vista teórico tradicional. Algunas de las propiedades más sorprendentes de los superconductores son:

1. Un superconductor no tiene una resistividad eléctrica medible. Esto quiere decir que una vez que una corriente se ha establecido en un superconductor, esta se mantiene constante (no hay pérdidas) por tanto tiempo como se ha podido observar.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

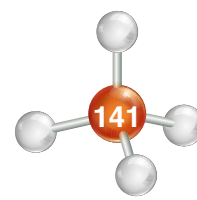
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





- Los superconductores se pueden comportar como un diamagneto perfecto en la presencia de campos magnéticos (no muy grandes). Lo que quiere decir que en el interior de materiales superconductores, el campo magnético se anula completamente (efecto Meissner). Este fenómeno produce efectos curiosos, tales como la levitación de un imán sobre un material superconductor.
- Un superconductor se comporta como si tuviera una banda prohibida centrada alrededor del nivel de Fermi. El ancho de la banda prohibida incrementa en tamaño conforme la temperatura baja.

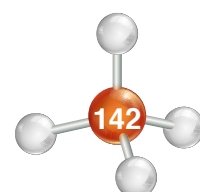
Figura 5.24. Elementos superconductores.

Los primeros elementos y compuestos que mostraron propiedades superconductoras tenían temperaturas críticas extremadamente bajas (20K o menos). Con el tiempo se fueron descubriendo nuevos materiales con temperaturas críticas más y más altas. La lucha por aumentar la temperatura crítica a temperatura ambiente, o cerca de ésta, ha sido intensa, principalmente debido al interés de implementar materiales superconductores en aplicaciones para la vida diaria (ej. trenes que leviten), sin embargo, hasta la fecha esto ha sido imposible y en consecuencia las aplicaciones de los superconductores han sido muy limitadas.

**PROBLEMA TIPO:**

El óxido de itrio, bario y cobre ( $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ), o YBCO por sus siglas en inglés, fue el primer material reportado con una temperatura crítica superior al punto de ebullición del nitrógeno líquido (77 K). El YBCO, tiene una temperatura crítica de 93 K. Si a 120 K la resistividad del YBCO es de  $6.5 \times 10^{-3} \Omega/\text{cm}$ . Calcule la resistividad de una pastilla de YBCO que se encuentra a 80 K.

*Solución:* Dado que la temperatura crítica del YBCO es de 93 K, podemos deducir la resistividad de la pastilla será de cero, debido a que 80 K es una temperatura menor a la temperatura crítica.







## 5.6 Cristales: celdas unitarias y tipos de cristales

Los sólidos pueden ser divididos en dos categorías: cristalinos y amorfos. El hielo, por ejemplo, es un sólido cristalino que posee un ordenamiento estricto y de gran alcance. Sus átomos, moléculas o iones ocupan posiciones específicas. Las fuerzas responsables de la estabilidad de un cristal pueden ser iónicas, covalentes, de van der Waals, de enlace de hidrógeno o una combinación de algunas o todas éstas. Por el otro lado, un sólido amorfo, como el vidrio, carece de un ordenamiento específico y de gran alcance.

### 5.6.1 La red

Un cristal es un objeto sólido en el cual se repite un patrón básico, una y otra vez, en tres dimensiones. Para describir su estructura sólo es necesario conocer el "motivo" más simple que se repite, así como la longitud y las direcciones de los tres vectores que describen la repetición de dicho motivo en el espacio (Figura 5.25). El motivo puede ser una molécula o un bloque de construcción de una estructura interconectada. Normalmente, el motivo consiste de varios componentes que pueden ser convertidos en otros mediante operaciones de simetría. Los tres vectores  $a$ ,  $b$ ,  $c$  que describen la traslación del motivo en el espacio se denominan *vectores básicos*. Al realizar operaciones entre vectores se genera una red.

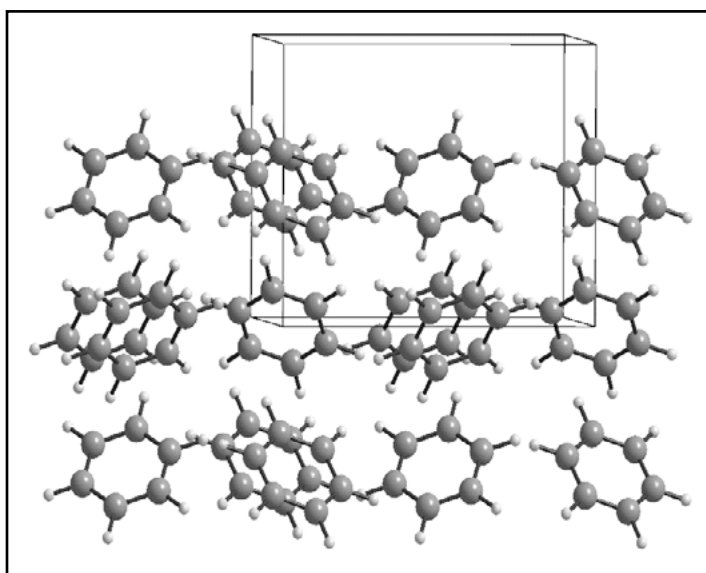
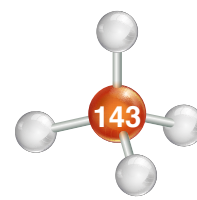


Figura 5.25. Empaquetamiento cristalino de benceno a 100K.

### 5.6.2 Celda unitaria

El volumen repetible más pequeño de una red se denomina *celda unitaria*. Dicho volumen está caracterizado por las tres constantes de red (vectores o ejes cristalográficos)  $a$ ,  $b$ ,  $c$  y por tres ángulos  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , los cuales separan a los tres vectores entre sí. Por definición  $\alpha$  es el ángulo entre los vectores  $b$  y  $c$ ,  $\beta$  es el ángulo entre los vectores  $a$  y  $c$ , y  $\gamma$  entre los vectores  $a$  y  $b$ . El posicionamiento de los átomos en las celdas unitarias se realiza tomando como referencia los ejes cristalográficos. Las constantes de red son utilizadas como unidades (números enteros) y las posiciones de los átomos se expresan en coordenadas fraccionarias  $x$ ,  $y$ ,  $z$ , las cuales describen las fracciones de las constantes de red  $a$ ,  $b$  y  $c$ , respectivamente. Por ejemplo, las coordenadas de un átomo localizado en el centro de una celda unitaria se expresan como:  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ .

Generalmente, las longitudes de las constantes de red para estructuras con moléculas orgánicas o inorgánicas van desde 3 hasta 40 Å, mientras que para estructuras de proteínas llegan hasta los 100 Å o más. Una estructura cristalina es resuelta si la ubicación y el tipo de todos los átomos dentro de la celda unitaria son conocidos. De manera general, puede haber desde 1 átomo hasta más de 1000 átomos en la celda.







La Figura 5.26 muestra una celda unitaria y su extensión en tres dimensiones (red). En este caso, cada esfera representa un átomo y se denomina *punto reticular*. Por lo regular el punto reticular en realidad no contiene a un solo átomo sino a varios átomos, iones o hasta moléculas distribuidas de forma idéntica alrededor de cada punto reticular. Para simplificar la visualización de la red y la celda unitaria suponemos que cada punto reticular está ocupado por un solo átomo. Lo anterior se cumple para los metales.

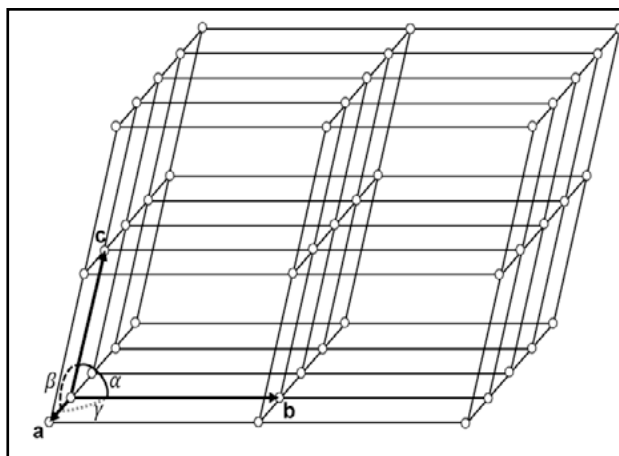


Figura 5.26. Porción de una red

### 5.6.3 Los siete sistemas cristalinos

Una celda cristalina puede presentar una de las siete formas básicas mostradas en la Figura 5.27. La geometría de la celda unitaria cúbica es particularmente simple porque todos los lados y ángulos son iguales. Cualquiera de las siete celdas unitarias de la figura que se repitan en el espacio tridimensional forman una estructura reticular característica de un sólido cristalino.

Para describir una estructura cristalina, de manera clara y sin ambigüedades, existen reglas para nombrar a los ejes de la celda unitaria. Por ejemplo, en el sistema triclínico no hay reglas (restricciones) para la selección de ángulos y aristas de la celda, pero en el caso del sistema monoclinico existe un eje único, el cual es perpendicular a los otros dos ejes (ver Tabla 5.3). Este eje único es denominado normalmente como *b* por lo que el ángulo sin restricción es  $\beta$ , mientras que los ejes *a* y *c* son fijados de tal forma que  $\beta \geq 90^\circ$ .

Restricción	Borde de Celda	Ángulo de celda
<b>Triclínico</b>	ninguno	ninguno
<b>Monoclínico</b>	ninguno	$\alpha = \gamma = 90^\circ$
<b>Ortorrómico</b>	ninguno	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
<b>Tetragonal</b>	$a = b$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
<b>Trigonal, Hexagonal</b>	$a = b$	$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$
<b>Cúbico</b>	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
<b>Romboédrico</b>	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

Tabla 5.3. Los siete sistemas cristalinos y sus parámetros de celda.

Cuando el eje denominado como fijo es el *c*, el ángulo sin restricciones es el  $\gamma$ . Algunos ejemplos de sistemas con el eje *c* fijo son: trigonal, hexagonal y tetragonal. Los parámetros que definen al tipo de cristal se basan en su simetría y conducen a ciertas relaciones entre las aristas y ángulos de la celda unitaria para cada sistema.

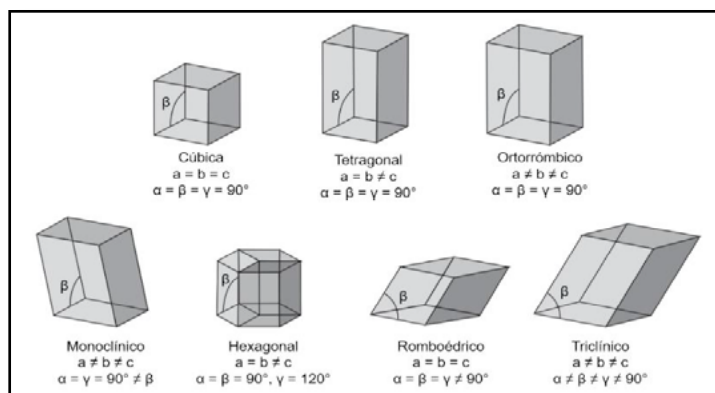


Figura 5.27. Los siete tipos de celdas unitarias. El ángulo  $\alpha$  está definido por las aristas *b* y *c*; el ángulo  $\beta$  por las aristas *a* y *c*, y el ángulo  $\gamma$  por las aristas *a* y *b*.



### 5.6.4 Las catorce redes de Bravais

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

Al establecer el concepto de red sostuvimos que los vectores base más pequeños posibles deben ser seleccionados para el cristal. La unidad menor en una red es la *celda unitaria*, que es, por tanto, el volumen más pequeño representativo del cristal como un todo. Esta unidad es considerada como *celda primitiva*. Las celdas mostradas en la Figura 5.28 se encuentran en una proyección 2-D, son primitivas y tienen el mismo volumen. La selección de la celda para la descripción de una estructura cristalina será aquella donde los elementos de simetría estén mejor descritos. Es decir, la celda con la mayor simetría posible. Usualmente, las celdas unitarias hexagonales (ej. apatita, nefelina, berilo) y las ortorrómbicas (ej. epsomita, hemimorfita, aragonita) son las de mayor simetría. En ocasiones son seleccionadas celdas unitarias más grandes, aunque contengan puntos adicionales de la red debido a la simetría mayor que presentan.

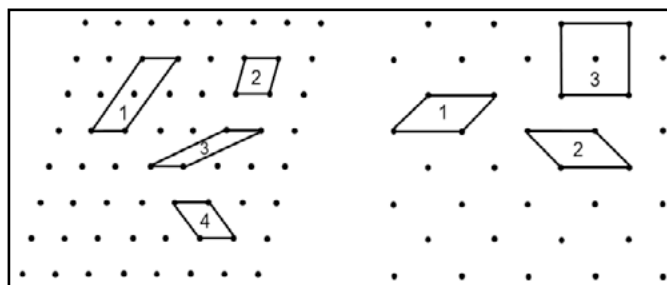


Figura 5.28. Izquierda, diferentes ejemplos de celdas unitarias primitivas en una red en proyección 2-D. Derecha, la opción 3 ilustra una red centrada.

Cuando las redes son descritas por celdas unitarias más grandes que las seis redes primitivas se adicionan ocho redes centradas, las cuales describen las catorce redes de Bravais (Figura 5.29). Las redes primitivas se expresan con el símbolo *P*. El símbolo *F* se asigna a las redes centradas en las caras A, B y C, mientras que el símbolo *I* se emplea para celdas unitarias en redes centradas en el cuerpo.

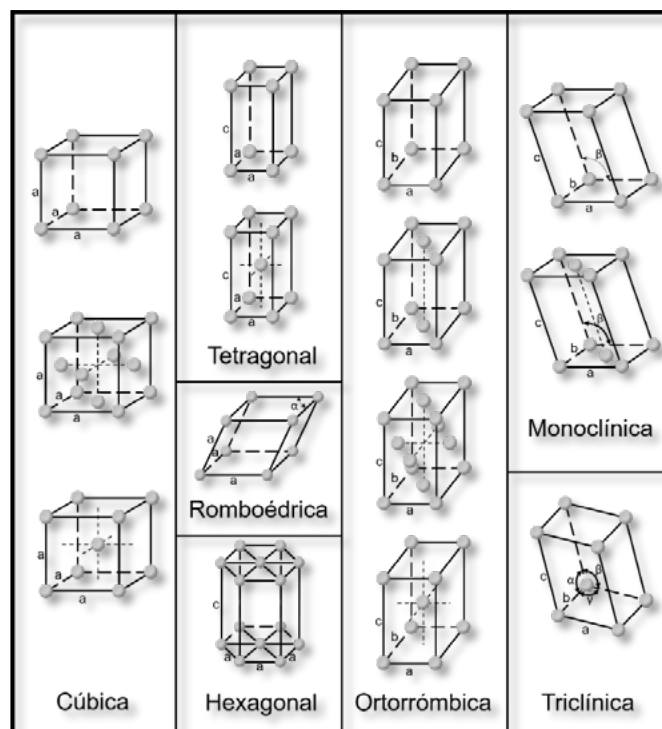


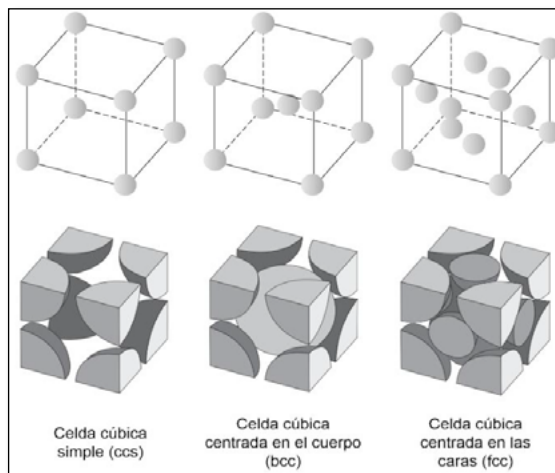
Figura 5.29. Las catorce redes de Bravais en 3-D, agrupadas de acuerdo a los siete sistemas cristalinos.

### 5.6.5 Empaquetamiento de esferas

La descripción de las estructuras cristalinas se realiza mediante la selección de la celda unitaria, la cual proporciona información sobre los átomos dentro de la celda con base en su tamaño y su forma. Conocer la celda unitaria, así como las coordenadas atómicas, no es suficiente para integrar una imagen de la estructura en tres dimensiones. Esta imagen se consigue considerando diferentes factores. Por ejemplo, una sección mayor de la estructura que involucre varias celdas unitarias, el arreglo de los átomos entre sí, su número de coordinación y el tipo de enlace, entre otros. Las aproximaciones más útiles al describir las estructuras son denominadas *empaquetamiento de esferas* y *empaquetamiento compacto*. Ninguna de estas aproximaciones puede ser aplicada a todos los tipos de estructuras y ambos tienen ventajas y limitaciones. No obstante, proporcionan un mejor entendimiento de la química del cristal (cristaloquímica) que, utilizando, únicamente, celdas unitarias.



En el empaquetamiento de esferas, la manera en que éstas se acomodan en capas determina el tipo de celda unitaria. En el caso más simple, una capa de esferas se puede distribuir como se muestra en la Figura 5.30. La estructura en 3-D se puede generar al colocar una capa encima y otra debajo de esa capa, de tal forma que las esferas de una capa están encima directamente de las esferas de la capa inferior. Este procedimiento puede extenderse para generar muchas capas como en el caso de un cristal. En la Figura 5.30, la esfera marcada con un x está en contacto con cuatro esferas en su misma capa, una más en la capa superior y otra en la capa inferior, dando un total de seis esferas vecinas en contacto directo. En este caso se trata de una celda cúbica simple (ccs): cada esfera tiene un *número de coordinación* de seis. El *número de coordinación* es definido como el número de átomos o iones que rodean a un átomo o ion en una red cristalina. Su valor es una medida del empaquetamiento de las esferas: cuanto mayor es el número de coordinación, más juntas se encontrarán las esferas. Otros ejemplos consisten en la celda cúbica centrada en el cuerpo (bcc) con número de coordinación de ocho y la celda cúbica centrada en las caras (fcc) con número de coordinación de doce.



# esferas ccs =  $8 * \frac{1}{8} = 1$ ; # esferas bcc =  $1 + (8 * \frac{1}{8}) = 2$ ; # esferas fcc =  $(8 * \frac{1}{8}) + (6 * \frac{1}{2}) = 4$ ;  
 Figura 5.30. Empaquetamiento de ccs (falta en figura), bcc y fcc.

Cada celda unitaria contiene una esfera en los vértices y cada esfera está compartida con ocho celdas unitarias. Puesto que un cubo tiene ocho vértices, el número total de esferas que hay en una ccs es de uno. En el caso de una bcc el número total de esferas es de dos; una esfera completa ocupa el centro del cuerpo y otra ocupa los vértices del cubo.

Para la fcc hay cuatro esferas: cada cara del cubo comparte cara con otra celda, por lo que cada celda contiene la mitad de una esfera ya que el cubo tiene seis caras. La celda fcc contiene tres esferas en las caras y una esfera en los vértices (Figura 5.30).

### 5.6.6 Empaquetamiento compacto

El arreglo más eficiente en tres dimensiones de esferas del mismo tamaño es el denominado *empaquetamiento compacto*. Muchas estructuras metálicas, iónicas, covalentes y moleculares presentan este arreglo cuya característica principal es que su estructura exhibe una densidad máxima. Otras consideraciones son requeridas cuando se tratan estructuras iónicas.

La manera más eficiente de empaquetar esferas del mismo tamaño en dos dimensiones es aquella donde cada esfera está en contacto con un máximo de seis vecinos (número de coordinación). Por repetición regular, se forman "láminas" infinitas de capas con empaquetamiento compacto. También se pueden lograr arreglos con un número de coordinación menor (cuatro), aunque a estos empaquetamientos no se consideran compactos. La manera más eficiente de empaquetar esferas del mismo tamaño en tres dimensiones es aquella donde se apilan láminas 2-D de capas con empaquetamiento compacto, resultando en dos tipos de estructuras: hexagonales compactas y cúbicas compactas.

La Figura 5.31 muestra el empaquetamiento compacto, el cual comienza obviamente, con la capa A, seguida por la capa (B). Las esferas se colocan en los huecos que hay entre las esferas de A, de manera que todas estén lo más juntas posible. La tercera capa puede acomodarse de dos maneras



distintas: en el primer caso, se acomoda sobre B igual que la primera capa (A), de manera que la tercera capa se denomina también con la letra A. En el segundo caso, las esferas de la tercera capa se colocan en los espacios remanentes de la capa A, por lo que a esta tercera capa se le denomina C. Entonces, el arreglo ABA corresponde a una estructura hexagonal, y el arreglo ABC a una estructura cúbica. Cada esfera de ambas estructuras tiene un número de coordinación de doce y no hay manera de aumentar la coordinación en estas estructuras.

Muchos metales y minerales forman cristales con estructuras hexagonales o cúbicas compactas: el Zirconio (Zr), el Rutenio (Ru), el Titanio (Ti) y el Zinc (Zn) forman cristales con estructura *hcp*. También la Cincita (ZnO), la Wurtzita (ZnS) y la Apatita ( $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{F}, \text{Cl}, \text{OH})$ ) exhiben estructuras hexagonales, mientras que el Aluminio (Al), el Cobre (Cu), el Níquel (Ni) y la Plata (Ag) forman cristales con estructura cúbica compacta (*ccp*, que se conoce como *fcc*), junto con la Halita (NaCl), la Galena (PbS) y la Blenda (ZnS). Los minerales están formados por dos o más tipos de átomos. En muchos casos los minerales son considerados compuestos de tipo iónico, es decir los átomos constituyentes tienen cargas opuestas y la estructura resultante es un balance de fuerzas atractivas y repulsivas, por lo que sus tamaños relativos afectan la estructura que adoptan. Para efectos prácticos es conveniente considerar que las estructuras iónicas como la Halita (NaCl) están constituidas por capas de aniones y capas de cationes empaquetadas de manera compacta, donde los aniones de las capas compactas no están en contacto directo. A este tipo de estructuras se les denomina *eutácticas*.

El tipo de estructura cristalina que adoptan los diferentes metales y minerales está dado por las fuerzas intermoleculares entre los átomos que la constituyen, mismas que dan mayor estabilidad al sólido. La representación de las estructuras cristalinas mediante el empaquetamiento de esferas y el empaquetamiento compacto sirve de herramienta para determinar el radio atómico de las esferas o la densidad del cristal.

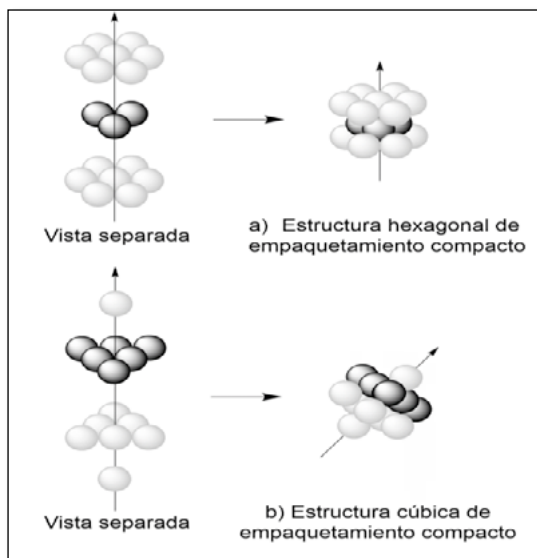
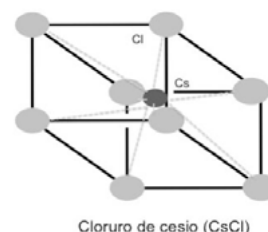


Figura 5.31. Vistas separadas de a) una estructura hexagonal de empaquetamiento compacto, y b) una estructura cúbica de empaquetamiento compacto. La flecha inclinada es para mostrar con más claridad la celda unitaria cúbica centrada en las caras.

**PROBLEMA TIPO.**

El cloruro de cesio tiene una estructura cristalina cúbica simple, en la que los vértices de su celda unitaria son ocupados por iones  $\text{Cl}^-$  y en el centro del cubo se encuentra un ion  $\text{Cs}^+$ . Con base en esta información determine la fórmula que corresponde a este compuesto.



*Solución:*

Los átomos de las esquinas participan en 8 celdas unitarias, por lo que su aporte a cada una de ellas es de 1/8. El átomo de Cs en el centro de la celda unitaria sólo participa en ésta, de tal forma que la fórmula del compuesto es CsCl.





**PROBLEMA TIPO.**

La calcita ( $\text{CaCO}_3$ ) y la dolomita ( $\text{CaMg}[\text{CO}_3]_2$ ) son minerales sedimentarios que pertenecen a la familia de los carbonatos. Ambos tienen una estructura cristalina romboedra-trigonal con capas de carbonatos ( $\text{CO}_3$ ) y metales intercalados entre las capas.

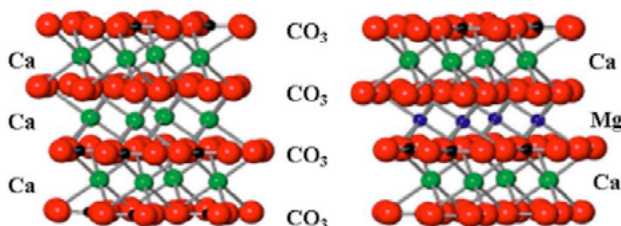


Figura 5.32 Estructuras cristalinas de la calcita (izquierda) y de la dolomita (derecha)

A pesar de sus similitudes estructurales, la presencia de diversos iones metálicos genera propiedades físicas y químicas significativamente diferentes. Por ejemplo, la dureza, la compresibilidad y la solubilidad de estos minerales varía de manera importante. Desde el punto de vista químico también existen divergencias: la calcita efervesce en agua ácida, mientras que la dolomita no lo hace. Otra propiedad de la dolomita es su capacidad para absorber otros iones metálicos, en particular, hierro y manganeso.

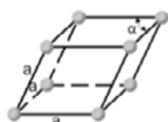
Diga cuáles son los parámetros de la celda, de acuerdo con la clasificación de los sistemas cristalinos.

Solución: El sistema cristalino de la calcita y la dolomita es el mismo, esto es, romboédrico. Los parámetros de celda son:

Sistema Cristalino

Magnitud de vectores de celda

Ángulos de celda



$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

**5.7 Autoevaluación**

**Cuestionario de autoevaluación del Capítulo 5**

**Cuestionario de autoevaluación del Tema 5.2**

Instrucciones: Lee atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraya la respuesta correcta.

- Según la Teoría de Enlace Valencia (TEV) la molécula de oxígeno debería ser:
  - Paramagnética
  - Electromagnética
  - Diamagnética
- El llenado de los Orbitales Moleculares (OM) se realiza a partir de la energía más baja hasta la más alta. A este Principio se le conoce como:
  - Exclusión de Pauli
  - Aufbau
  - Conservación de masa





3. Si dos átomos (A y B) participan en la formación de un enlace (A–B) y se encuentran a una distancia relativamente grande, los OM de enlace y antienlace resultantes tendrán una diferencia de energía:  
a) Pequeña                                      b) Grande                                      c) Singular
4. El traslape máximo de orbitales atómicos (OA) no depende de:  
a) Simetría                                      b) Orientación                                      c) Color
5. Las moléculas diatómicas pueden dividirse en dos grupos:  
a) Homonucleares y                                      b) Primarias y                                      c) Homogéneas y  
heteronucleares                                      secundarias                                      heterogéneas
6. Los orbitales moleculares  $\sigma_{1s}$  y  $\sigma^*_{1s}$  pueden acomodar hasta un máximo de de:  
a) 16 electrones                                      b) 8 electrones                                      c) 4 electrones
7. Indica la fuerza aproximada de un enlace:  
a) Electronegatividad                                      b) Orden de enlace                                      c) Energía de ionización
8. La configuración electrónica del átomo de Argón es:  
a)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$                                       b)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$                                       c)  $1s^2 2s^0 2p^6 3s^1 3p^6$
9. El enlace para la molécula de Li–F es considerado preponderadamente:  
a) Covalente                                      b) Iónico                                      c) Metálico
10. El átomo más electronegativo en la molécula de cloruro de sodio (NaCl) es:  
a) Sodio                                      b) Cloro                                      c) Cloruro de sodio

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

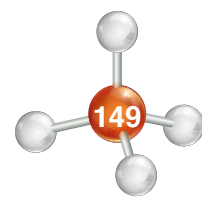
Cap. 21

Cap. 22

### Cuestionario de autoevaluación del Tema 5.3

Instrucciones: Lee atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraya la respuesta correcta.

1. El empaquetamiento compacto, conocido como la disposición de un número infinito de celdas, ocurre en la naturaleza para:  
a) Gases                                      b) Líquidos                                      c) Cristales
2. De acuerdo con el triángulo de Arkel-Keterlaar, el cloruro de azufre ( $\text{SCl}_2$ ) es considerado en el grupo de:  
a) Metales y aleaciones                                      b) Materiales moleculares                                      c) Materiales iónicos
3. La combinación de electronegatividades para un enlace de tipo covalente es:  
a)  $EN_A$  baja +  $EN_B$  baja                                      b)  $EN_A$  baja +  $EN_B$  alta                                      c)  $EN_A$  alta +  $EN_B$  alta
4. La estructura cristalina del sodio metálico se conoce como:  
a) Cúbica centrada en el cuerpo                                      b) Cúbica centrada en las caras                                      c) Tetragonal





5. La teoría de mar de electrones considera:

- a) Iones positivos                      b) Iones negativos                      c) Iones positivos y electrones libres

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

### Cuestionario de autoevaluación del tema 5.4

Instrucciones: Lee atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraya la respuesta correcta.

1. En la Teoría de Orbitales Moleculares, al conjunto de orbitales muy próximos entre sí y con energías muy parecidas, son denominadas:

- a) Banda prohibida                      b) Banda de energía  
c) Banda de conducción              d) Banda de valencia

2. La banda con los orbitales que contienen a los electrones más externos de los átomos que se agrupan, se llaman:

- a) Banda prohibida                      b) Banda de energía  
c) Banda de conducción              d) Banda de valencia

3. Según la T.O.M. la gran separación entre las bandas de valencia y de conducción es lo que permite diferenciar a un material aislante de uno:

- a) Conductor                              b) Superconductor  
Metálico                                  d) No metálico

4. Es el nivel de mayor energía ocupado a la temperatura del cero absoluto (0 Kelvin) y es de fundamental importancia en la teoría de bandas:

- a) Energía radiante                      b) Energía basal  
c) Energía de Fermi                      d) Energía de ionización

5. Los niveles ocupados de la banda de valencia se traslapan energéticamente con la banda de conducción que está vacía, en un material:

- a) Aislante                      b) Conductor                      c) Semiconductor                      d) Diamagnético

### Cuestionario de autoevaluación del tema 5.5

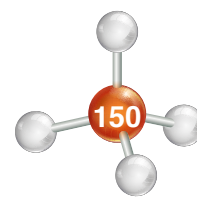
Instrucciones: Lee atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraya la respuesta correcta.

1. El hecho de que muy pocos electrones puedan ser promovidos de la banda de valencia a la de conducción explica por qué la conductividad es muy pobre en un material:

- a) Conductor                              b) Aislante  
c) Semiconductor                      d) Superconductor

2. Tendencia de la conductividad en la mayoría de los semiconductores, con respecto a un incremento de la temperatura:

- a) Disminuye                              b) Incrementa  
c) Se mantiene                              d) No tiene relación





3. Los semiconductores intrínsecos están constituidos por:
  - a) Elementos puros
  - b) Halógenos
  - c) Materiales dopados
  - d) Metales alcalinos
4. Los semiconductores extrínsecos se caracterizan por contar en su estructura con:
  - a) Elementos puros
  - b) Halógenos
  - c) Materiales dopados
  - d) Metales alcalinos
5. Un semiconductor extrínseco de tipo "p" es aquel cuya impureza dopante aporta:
  - a) Exceso de carga
  - b) Estabilidad
  - c) Afinidad electrónica
  - d) Deficiencia de carga
6. En un material semiconductor extrínseco de tipo "n", las impurezas proporcionan:
  - a) Exceso de carga
  - b) Estabilidad
  - c) Afinidad electrónica
  - d) Deficiencia de carga
7. En un material semiconductor de tipo "p" los electrones de la banda de valencia ocupan niveles ligeramente más altos en energía denominados:
  - a) Banda prohibida
  - b) Niveles dadores
  - c) Niveles aceptores
  - d) Banda de valencia
8. La superconductividad es un estado de la materia en la que al disminuir la temperatura de un material por debajo de un valor crítico ( $T_c$ ) su resistividad eléctrica:
  - a) Se hace variable
  - b) Incrementa
  - c) Disminuye hasta cero
  - d) No se modifica
9. Son ejemplos de elementos que presentan propiedades superconductoras a muy bajas temperaturas:
  - a) Neón y argón
  - b) Osmio y titanio
  - c) Hierro y cobre
  - d) Fósforo y azufre
10. Si al interior de un material superconductor el campo magnético se anula completamente, el fenómeno es denominado:
  - a) Efecto Meissner
  - b) Efecto Doppler
  - c) Nivel de Fermi
  - d) Temperatura crítica

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

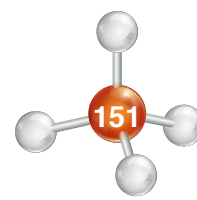
Cap. 21

Cap. 22

### Cuestionario de autoevaluación del tema 5.6

Instrucciones: Lee atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraya la respuesta correcta.

1. Objeto sólido en el cual se repite un patrón básico, una y otra vez, en tres dimensiones:
  - a) Cristal
  - b) Celda unitaria
  - c) Red cristalina
  - d) Ninguna de las anteriores





2. Un sólido cristalino se distingue de uno amorfo en que las partículas que lo integran poseen:
  - a) Baja estabilidad
  - b) Alta energía
  - c) Arreglo de gran alcance
  - d) Posiciones variables
3. La estructura de un sólido cristalino puede ser descrita como una red, cuyo volumen repetible más pequeño se llama:
  - a) Celda unitaria
  - b) Molécula
  - c) Red cristalina
  - d) Empaquetamiento
4. Subraya la respuesta que contenga tres de los siete sistemas cristalinos:
  - a) Cúbica, rómbica y tetragonal
  - b) Ortorrómbica, esférica y cúbica
  - c) Esférica, tetragonal y monoclinica
  - d) Ninguna de las anteriores
5. Los ejes cristalográficos que definen a una celda unitaria específica se designan como:
  - a)  $x, y, z$
  - b)  $a, b, c$
  - c)  $n, l, m$
  - d)  $\alpha, \beta, \gamma$
6. En una celda unitaria cada punto reticular puede representar la posición de:
  - a) Un átomo
  - b) Un ion
  - c) Una molécula
  - d) Cualquiera de las anteriores
7. Es la celda unitaria más simple, en la que todos sus lados y ángulos son iguales ( $90^\circ$ ):
  - a) Tetragonal
  - b) Octaédrica
  - c) Monoclinica
  - d) Cúbica
8. Es el conjunto de catorce redes cristalinas que incluyen los siete tipos de celdas unitarias y algunas variantes para describir la mayor simetría de cualquier arreglo cristalino:
  - a) Celdas primitivas
  - b) Redes de Bravais
  - c) Parámetros de celda
  - d) Ninguno de los anteriores
9. Es una aproximación útil para representar la estructura tridimensional de un sólido cristalino, la cual considera el número de coordinación de cada átomo o ion:
  - a) Empaquetamiento
  - b) Celda unitaria
  - c) Redes de Bravais
  - d) Empaquetamiento compacto de esferas
10. Es el arreglo tridimensional más eficiente de esferas del mismo tamaño:
  - a) Empaquetamiento
  - b) Celda unitaria
  - c) Redes de Bravais
  - d) Empaquetamiento compacto de esfera

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

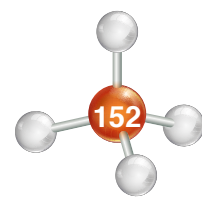
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





# Capítulo 6

## Estequiometría

Ana Laura Pérez Martínez, Maricela Robles Cruz,  
Nitizia Ceballos Servin, Rogelio Soto Ayala, Noé Santillán Piña

### 6.1 Introducción

En la naturaleza se puede observar una infinidad de materia, desde la arena más fina que se encuentra en las playas hasta las grandes y complejas montañas de hermosos paisajes. Toda esta materia que integra lo que se observa ocupa un espacio y una masa determinadas. Cabe recordar que la materia está conformada de átomos, moléculas, iones, etc., partículas tan diminutas que son imposibles de observar a simple vista, y que para su visualización se requieren técnicas muy especiales.

En este capítulo se revisarán aquellos conceptos que constituyen los fundamentos de la estequiometría, que es la parte de la Química que estudia las relaciones cuantitativas entre los reactivos y los productos en una reacción química.

En el medio ambiente, ya sea por causas naturales o antropogénicas, tienden a ocurrir distintas reacciones entre las sustancias que conforman el entorno. Las reacciones químicas se presentan, por ejemplo, en el interior del cuerpo humano por las sustancias que lo conforman, en el agua por la interacción de minerales disueltos, en el suelo por el uso de fertilizantes, en el aire por la contaminación, solo por mencionar algunas ya que el campo de estudio es muy amplio.

### 6.2. Conceptos de mol y masa molar

#### 6.2.1 Concepto de mol

La palabra *mol* engloba determinada cantidad de materia. De acuerdo con su definición, una mol es la cantidad de sustancia que contiene tantas entidades fundamentales como átomos hay en doce gramos de carbono-12. El número de átomos que hay en doce gramos de carbono-12 se conoce como número de Avogadro, el cual tiene un valor de  $6.0221415 \times 10^{23}$  unidades, en este caso, de átomos. Para entender mejor este concepto se puede comparar con ejemplos, tales como decir un *par* de brújulas, una *docena* de fósiles, una *mol* del mineral calcopirita ( $\text{CuFeS}_2$ ), etc. De los ejemplos anteriores, la palabra *par* engloba dos unidades de algún objeto a considerar, la palabra *docena* hace referencia a doce unidades y en el caso de la palabra *mol* hace referencia al valor de  $6.0221415 \times 10^{23}$  unidades.

### Sumario

#### 6.1 Introducción

#### 6.2 Conceptos de mol y masa molar

#### 6.3 Relaciones estequiométricas: relación en entidades fundamentales, relación molar y relación en masa

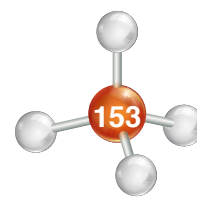
#### 6.4 Reacciones ácido-base y pH

#### 6.5 Cálculos estequiométricos: reactivo limitante y en exceso, rendimientos teórico, experimental y porcentual

#### 6.6 La fase gaseosa y la ecuación del gas ideal

#### 6.7 Unidades de concentración: molaridad, porcentajes masa/masa, masa/volumen y volumen/volumen, fracción molar y partes por millón

#### 6.8 Autoevaluación







De esta manera, el concepto de mol está asociado con el número de partículas microscópicas indicadas anteriormente, a través del número de Avogadro.

Por ejemplo, para saber cuál es la masa de un solo átomo de plata (Ag) se recurre a su *masa molar* (que es la masa que tiene una mol de átomos de plata), la cual es de 107.9 [g/mol] (en el apéndice A se encuentra una tabla periódica con masas molares de los elementos) si se tiene que en la masa molar están incluidos  $6.0221415 \times 10^{23}$  átomos de Ag se realiza la división correspondiente para saber la masa de un solo átomo.

$$\frac{107.9 \text{ g/mol de plata}}{6.0221415 \times 10^{23} \text{ átomos de plata/mol}} = 1.792 \times 10^{-22} \text{ g/mol}$$

El manejo en química del número de Avogadro permite darse una idea del orden de magnitud de cantidades muy pequeñas, tal como la masa de un átomo de plata.

De acuerdo con la definición del número de Avogadro<sup>1</sup>, se pueden establecer las siguientes igualdades:

- 1 mol de iones =  $6.0221415 \times 10^{23}$  iones
- 1 mol de electrones =  $6.0221415 \times 10^{23}$  electrones
- 1 mol de átomos de cobre (Cu) =  $6.0221415 \times 10^{23}$  átomos de cobre (Cu)
- 3 mol de moléculas de calcita ( $\text{CaCO}_3$ ) =  $3 (6.0221415 \times 10^{23})$  moléculas de calcita ( $\text{CaCO}_3$ )

### 6.2.2 Concepto de masa molar

Como se mencionó anteriormente, la *masa molar* es la masa de una mol de unidades (pueden ser átomos, moléculas, iones, etc.) de determinada sustancia. El sistema internacional de unidades establece como unidad de masa al kilogramo por lo que la masa molar puede expresarse en kilogramos [kg], aunque generalmente se indica en gramos [g].

La relación entre el número de moles (n) de una sustancia y su masa (m) es la siguiente:

$$n = \frac{m}{M}$$

En la que M es la masa molar de la sustancia.

Si m se expresa en g, y M, en  $\frac{g}{mol}$ , el número de moles se expresa en mol.

$$\text{Número de moles [mol]} = \frac{m [g]}{M \left[ \frac{g}{mol} \right]} \dots \dots \dots \text{Ec. 6.1}$$

Despejando la masa de la (ec. 6.1) se tiene:

$$\text{Masa} = (\text{masa molar} \times \text{número de moles}) \dots \dots \dots \text{Ec. 6.2}$$

**PROBLEMA TIPO:**

En una mina se extraen metales de oro (Au) y plata (Ag). Considerando que por día se obtienen 7800 toneladas de roca, en un período de 29 días trabajados obtenemos un total de 226,200 toneladas de roca por mes. De las toneladas de roca obtenidas en el mes se obtuvieron 294.06[kg] de oro y 65,598 [kg] de plata.

- a) Calcule los gramos de oro y plata que se obtuvieron por tonelada
- b) Calcule los moles de oro y de plata que se obtuvieron por tonelada
- c) Calcule la cantidad de átomos de oro y plata por tonelada

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

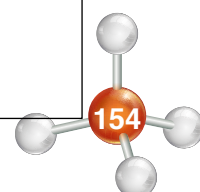
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





Solución:

- a) Para obtener los gramos por tonelada se divide la cantidad de oro y de plata entre el total de toneladas.

ORO (Au)	PLATA (Ag)
$(294.06 \text{ [kg]}) \left( \frac{1000 \text{ [g]}}{1 \text{ [kg]}} \right)$ de oro por tonelada $= 294060 \text{ [g] de oro por tonelada}$	$(65,598 \text{ [kg]}) \left( \frac{1000 \text{ [g]}}{1 \text{ [kg]}} \right)$ de plata por tonelada $= 65598000 \text{ [g] de plata por tonelada}$
$\left( \frac{294060 \text{ [g] Au por tonelada}}{226,200 \text{ toneladas}} \right) = 1.3 \text{ [g] Au}$	$\left( \frac{65598000 \text{ [g] Ag por tonelada}}{226,200 \text{ toneladas}} \right) = 290 \text{ [g] Ag}$

Se obtuvieron 1.3 gramos de oro por tonelada y 290 gramos de plata por tonelada. Por medio de la tabla periódica se tiene que la masa de una mol de oro es de 197 [g] y de una mol de plata es de 107.9 [g].

b)

Para 1.3 [g] de oro realizamos la conversión.

$$\text{moles de Au} = (1.3 \text{ [g]}) \left( \frac{1 \text{ mol de Au}}{197 \text{ [g]}} \right) = 6.599 \times 10^{-3} \text{ moles de Au}$$

Para la plata se realiza el mismo procedimiento. La masa de una mol de plata es de 107.9 [g], si se obtuvieron 290 [g/ton] realizamos la conversión.

$$\text{moles de Ag} = (290 \text{ [g]}) \left( \frac{1 \text{ mol de Ag}}{107.9 \text{ [g]}} \right) = 2.688 \text{ moles de Ag}$$

c)

Para calcular el número de átomos de Au:

$$\text{Átomos de Au} = (6.599 \times 10^{-3} \text{ moles de Au}) \left( \frac{6.0221415 \times 10^{23} \text{ átomos de Au}}{1 \text{ mol de Au}} \right)$$

$$6.599 \times 10^{-3} \text{ moles de oro (Au)} = 3.974 \times 10^{21} \text{ átomos de oro (Au) por tonelada}$$

Para calcular el número de átomos de Ag:

$$\text{Átomos de Ag} = (2.688 \text{ moles de Ag}) \left( \frac{6.0221415 \times 10^{23} \text{ átomos de Ag}}{1 \text{ mol de Ag}} \right)$$

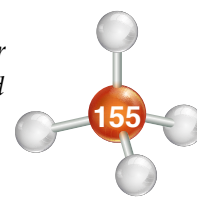
$$2.688 \text{ moles de plata (Ag)} = 1.619 \times 10^{24} \text{ átomos de plata (Ag) por tonelada}$$

### 6.3 Relaciones estequiométricas: relación en entidades fundamentales, relación molar y relación en masa.

La *estequiometría* (del griego στοιχειον, stoicheion, 'elemento' y μετρον, métrón, 'medida') se encarga de la medición cuantitativa de los componentes que intervienen una reacción química.

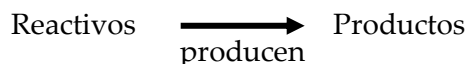
La ley de la conservación de la materia dice que "la materia no se crea ni se destruye, solo se transforma"<sup>1</sup>, por lo que en cualquier reacción que ocurra, los átomos simplemente están siendo reacomodados.

<sup>1</sup> Propuesta, en 1785, por el químico francés Antoine-Laurent de Lavoisier y establece lo siguiente: "Podemos asentar como axioma incontrovertible que, en todas las operaciones del arte y la naturaleza, nada se crea; existe una cantidad





Una reacción química es un proceso en donde dos o más sustancias reaccionan, dando como resultado otra sustancia o sustancias. En una reacción química participan: los reactivos y los productos. Los “reactivos” que se caracterizan por ir del lado izquierdo de la ecuación química y los “productos” que se ubican al final de la ecuación y del lado derecho



A nivel nanométrico una reacción química se lleva a cabo por la colisión de partículas que intervienen, provocando que las uniones que existían en los reactivos se rompan y se facilite que se formen nuevas uniones dando lugar a los productos.

Para escribir de forma general una ecuación química y representar las reacciones se utilizan símbolos químicos. Por ejemplo, para obtener óxido de calcio, o cal viva, a partir de carbonato de calcio (Figura 6.1) es necesario calcinar este último. El otro producto que se obtiene es dióxido de carbono, en forma de ecuación lo anterior se representa de la siguiente manera:

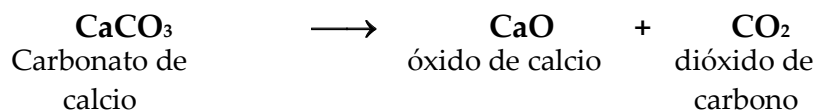
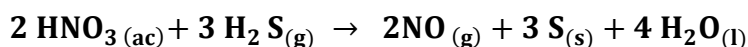


Figura 6.1 Calcita (CaCO<sub>3</sub>)  
Colección mineralógica  
“Andrés Manuel del Río”  
Facultad de Ingeniería,  
UNAM

Las reacciones químicas conocidas también como ecuaciones químicas (cuando se cumple la ley de la conservación de la materia) contienen gran cantidad de información cuantitativa y cualitativa. Por ejemplo, en la formación de óxido nítrico, cuya ecuación química es:



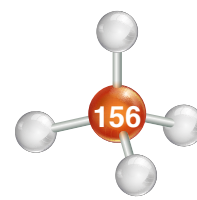
Reactivos

Productos

Se puede identificar lo siguiente:

1. Reactivos y productos resultantes.  
El ácido nítrico reacciona con el sulfuro de hidrógeno para producir óxido nítrico, azufre y agua.
2. Nombre y fórmula química para cada reactivo y producto.  
Ácido nítrico (HNO<sub>3</sub>), sulfuro de hidrógeno (H<sub>2</sub>S), óxido nítrico (NO), azufre(S), agua (H<sub>2</sub>O).
3. Estado físico de reactivos y productos.  
Ácido nítrico (acuoso), sulfuro de hidrógeno (gas), óxido nítrico (gas), azufre (sólido) y agua (líquida).
4. El número de moles de reactivos y productos (coeficientes de la ecuación química) que se pueden interpretar como:  
2 moles de ácido nítrico reaccionan con 3 moles de sulfuro de hidrógeno para producir 2 moles de óxido nítrico, 3 moles de azufre y 4 moles de agua.
5. Las masas de las sustancias que reaccionan y las que se obtienen.

igual de materia tanto antes como después del experimento”. (cita tomada de Brown, T.L., LeMay Jr., H.E., Bursten, B.E., Murphy, Burdge, J.R., (2004), *Química la ciencia central* (9ª Ed.). México: Pearson Educación)



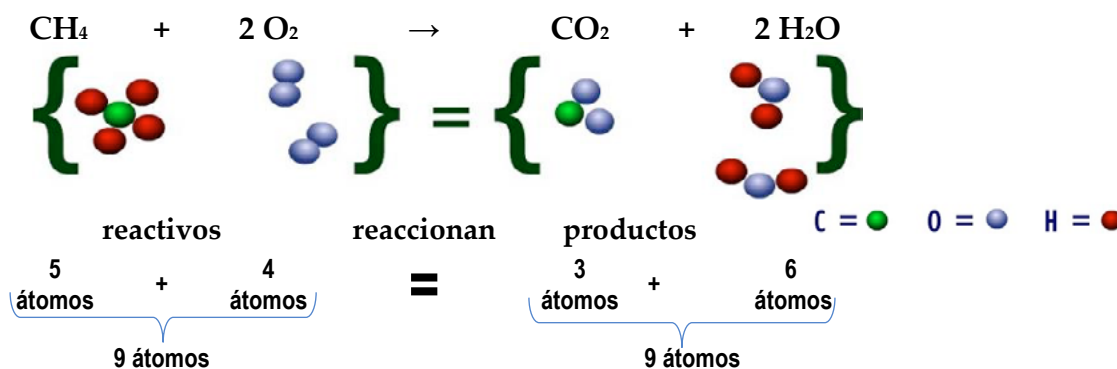


Las reacciones son pieza clave en la química, ya que permiten el estudio de distintos fenómenos de nuestro entorno, a través de su conocimiento se pueden solucionar distintos problemas como la contaminación del aire, agua o suelo. Es aplicable al área de las ciencias ambientales, químicas, geológicas, biológicas, entre otras; su campo se amplía debido a que en la naturaleza se encuentran una infinidad de reacciones químicas, por ejemplo, cuando ocurre una erupción volcánica, cuando se libera el metano y reacciona con el oxígeno, el agua subterránea al estar en contacto con diversos minerales, el suelo al reaccionar con fertilizantes, el aire y los contaminantes, solo por mencionar algunas.

### 6.3.1 Relación en entidades fundamentales

Al analizar una reacción química, se debe cumplir que el número de átomos de un elemento determinado sea el mismo antes y después de la reacción.

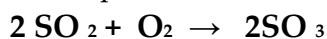
En la siguiente reacción de combustión<sup>2</sup>



- Se parte de un C en el metano (CH<sub>4</sub>) en los reactivos y se obtiene una C en el dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) en los productos.
- Existen 4 átomos de oxígeno en las 2 moléculas diatómicas en los reactivos y se obtienen 2 átomos que constituyen la molécula de CO<sub>2</sub> y 2 moléculas de agua (H<sub>2</sub>O) que aportan 1 átomo de oxígeno cada una, dando un total de 4 átomos de oxígeno en los productos.
- El CH<sub>4</sub> aporta 4 átomos de H en los reactivos y se obtienen 4 átomos del mismo provenientes de las dos moléculas de agua formadas en los productos.

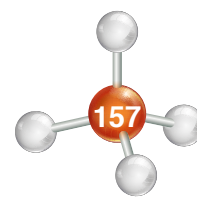
Con lo anterior queda claro que el número total de átomos antes y después de la reacción química no cambia y que el número de átomos de cada tipo es igual antes y después de la reacción.

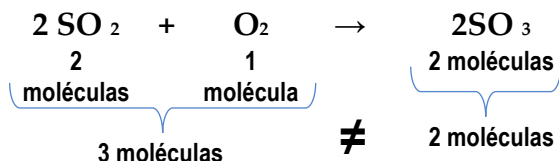
A nivel molecular, no necesariamente se deben de conservar el número de moléculas antes y después de la reacción, ya que existe un reordenamiento de los átomos y estos pueden condensarse o romper las moléculas para dar lugar a otras nuevas en los productos. En la combustión del dióxido de azufre (SO<sub>2</sub>) se le adiciona un oxígeno a la molécula para dar lugar al trióxido de azufre (SO<sub>3</sub>), lo que se puede expresar como:



Como se puede apreciar no existen el mismo número de moléculas en los reactivos que en los productos, la relación molecular de la reacción anterior es:

<sup>2</sup> Reacción química exotérmica de una sustancia. (o una mezcla de ellas) denominada combustible, con el oxígeno.



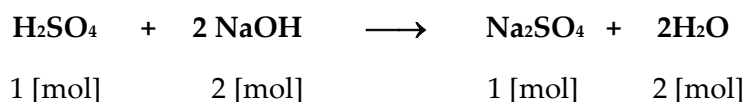


Pero si existe una relación entre el número de moléculas, la cual se puede expresar como: 2 moléculas de SO<sub>2</sub> requiere de 1 molécula de O<sub>2</sub> para producir 2 moléculas de SO<sub>3</sub>.

### 6.3.2 Relación molar

Como su nombre lo indica este tipo de relación estequiométrica se expresa en mol.

En este caso para la reacción que ocurre entre el ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) y el hidróxido de sodio (NaOH), la relación molar es:



Lo cual significa que una mol de ácido sulfúrico requiere de dos moles de hidróxido de sodio, para producir una mol de sulfato de sodio (Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) y dos moles de agua (H<sub>2</sub>O).

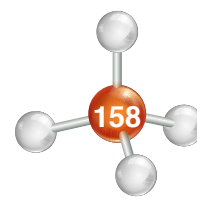
### 6.3.3 Relación en masa

La relación en masa se representa en gramos [g], y se obtiene a partir del número de moles de cada sustancia que participan en la reacción. De acuerdo con la relación molar expresada anteriormente para el ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) y el hidróxido de sodio (NaOH) se puede elaborar la tabla 6.1.

Reacción:	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	+	2 NaOH	→	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	+	2 H <sub>2</sub> O
Relación molar	1 [mol]		2 [mol]		1 [mol]		2 [mol]
masa molar M [g/mol]	H <sub>2</sub> = (2)(1) = 2		Na= 23		Na <sub>2</sub> = (2) (23) = 46		H <sub>2</sub> = (2)(1)
	S = 32		O = 16		S = 32.07		O = 16
	O <sub>4</sub> = 16 x 4 =64		H = 1		O <sub>4</sub> = (4) (16) =64		
	98 [ g/mol ]		40 [ g/mol ]		142.05 [ g/mol ]		18 [ g/mol ]
Masa Total [g]	98 [g/mol] X (1[mol])= 98 [g]		40 [g g/mol] X (2[mol])= 80 [g]		142.05 [g/mol] X (1[mol])= 142.05 [g]		18 [ g/mol ] X (2[mol])= 36 [g]
Total	suma reactivos= 98 [g] + 80 [g] suma reactivos= 178 [g]				suma productos= 142 [g] + 36 [g] suma productos= 178 [g]		

\* Los pesos o masas moleculares están redondeados a números enteros sin cifras decimales.

Tabla 6.1. Relaciones estequiométricas para una reacción de neutralización







Con este ejemplo se observa que la masa total de los reactivos corresponde a la masa total de los productos formados, siempre y cuando los reactivos se consuman totalmente (figura 6.2). Sin embargo, hay que tomar en cuenta que la masa se conserva en una reacción química, aunque la formación de productos no sea 100 % completa.

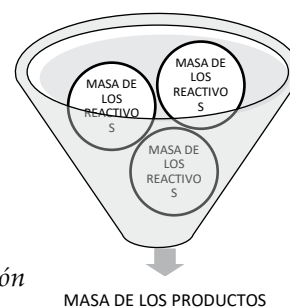


Figura 6.2. Esquema que representa la relación en masa que hay en una reacción química entre los reactivos y los productos.

**PROBLEMA TIPO:**

El ácido nítrico es una sustancia que se utiliza en la minería para la separación de los minerales, también se puede encontrar en la atmósfera y contribuir a la generación de la lluvia ácida. En el siguiente ejemplo se observa como el ácido nítrico ( $\text{HNO}_3$ ) reacciona con el agua dando lugar al ion hidronio ( $\text{H}_3\text{O}^+$ ) y al ion nitrato ( $\text{NO}_3^-$ ).

Expresa la reacción en su relación en entidades fundamentales, relación molar y relación en masa.

Solución:

Relaciones estequiométricas	$\text{HNO}_3 + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{NO}_3^-$			
Entidades fundamentales	1 [molécula]	1 [molécula]	1 [molécula]	1 [molécula]
Relación molar	1 [mol]	1 [mol]	1 [mol]	1 [mol]
Relación en masa	63 [g]	18 [g]	19 [g]	62 [g]

Para la relación en masa se realiza el siguiente procedimiento:

Reacción	$\text{HNO}_3 + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{NO}_3^-$			
masa molar [g]	H=1	H <sub>2</sub> = (2)(1) =2	H <sub>3</sub> = (3)(1) =3	N=14
	N=14	O=16	O=16	O <sub>3</sub> = (3)(16) O <sub>3</sub> = 48
	O <sub>3</sub> = (3) (16) = 48			
	63 [g]	18 [g]	19 [g]	62 [g]
Masa total	suma reactivos= 63 [g] + 18 [g] suma reactivos= 81 [g]		suma productos= 19[g] + 62[g] suma productos= 81[g]	

**6.4 Reacciones ácido-base y pH**

Las *reacciones ácido-base* son una clase muy importante de reacciones, que ocurren no únicamente en nuestro organismo, sino también en muchos ciclos que ocurren de manera natural en la Tierra, como el ciclo del carbono (C), nitrógeno (N), fósforo (P), azufre (S), donde las diferentes reacciones que se generan dan lugar a compuestos de naturaleza ácida o básica. Un ejemplo de esto lo constituye la lluvia ácida que se forma en la atmósfera de manera natural o como consecuencia de actividades realizadas por el hombre; otro ejemplo sería el drenaje ácido producto de la actividad minera generando contaminantes como el ácido nítrico o ácido sulfúrico.



Como en los ejemplos anteriores se pueden encontrar infinidad de reacciones que ocurren de manera natural o a consecuencia de actividades antropogénicas.

Entender como ocurren estas reacciones beneficia a las industrias y otras áreas, por ejemplo, en la minería se utilizan las reacciones para la separación de metales que se encuentran en los minerales. Además, ayuda en el tratamiento de contaminantes que se generan en el suelo, aire y agua.

El estudio de las reacciones ácido-base ha sido tema de estudio desde épocas antiguas, sus principales protagonistas hacen referencia a científicos como **Robert Boyle** en el siglo XVII, **Svante Arrhenius** en el siglo XIX y más recientemente a los químicos **Johannes Brønsted** y **Thomas Lowry** en el siglo XX, que además incorporan el concepto de par conjugado ácido-base. En la misma época surge la definición de **Gilbert N. Lewis** químico norteamericano que complementa esta definición incorporando la relación que tienen con los electrones.

Para comprender mejor los conceptos de ácidos y bases, es importante entender términos como *disolución*, la cual es una mezcla homogénea que resulta de dos o más sustancias y que está conformada de un *soluto*, que es la sustancia que se encuentre en menor proporción y un *disolvente*, que es la sustancia en la que se disuelve el soluto, por lo que su proporción será mayor.

En la naturaleza existen infinidad de disoluciones, uno de los disolventes más importantes, en el caso de Ciencias de la Tierra el agua actúa por su capacidad para disolver ciertos minerales (actuando como solutos). Al mencionar disolución acuosa, se entiende como disolvente el agua y se colocará como subíndice (*ac*).

Es importante recordar el concepto de *ion*, que se define como un átomo o un grupo de átomos que tienen carga positiva (catión) o negativa (anión). Al ocurrir las reacciones químicas los núcleos atómicos permanecen inalterables, pero los electrones se pueden ganar o perder en el proceso.

Un *catión* es un ion con carga positiva, es decir que ha perdido uno o más electrones. El *anión*, por otra parte, es un ion que ha ganado uno o más electrones adquiriendo una carga negativa.

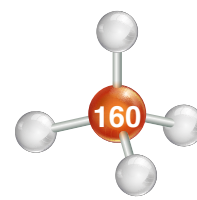
Algunos carbonatos se clasifican como ácidos, básicos e hidratados. Su clasificación dependerá de la composición química del carbonato, si contienen hidróxidos (OH<sup>-</sup>) son considerados básicos, si están conformados por algún ácido, por ejemplo, el ácido carbónico (HCO<sub>3</sub>) serán ácidos y si contienen agua (H<sub>2</sub>O) serán hidratados. La tabla 6.2 muestra algunos ejemplos de carbonatos.

Carbonatos básicos	Malaquita Cu <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (OH) <sub>2</sub>
Carbonatos ácidos	Nesquehonita (Mg(HCO <sub>3</sub> )(OH)2(H <sub>2</sub> O)), Trona (Na <sub>3</sub> (CO <sub>3</sub> )(HCO <sub>3</sub> )2(H <sub>2</sub> O))
Carbonatos hidratados	Gaylusita (Na <sub>2</sub> Ca(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> 5(H <sub>2</sub> O)) Lansfordita (MgCO <sub>3</sub> 5(H <sub>2</sub> O)) Thermonatrite (Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> ·(H <sub>2</sub> O)) natron Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> ·10(H <sub>2</sub> O) Lantanita ((La,Ce,Nd) <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> ·8(H <sub>2</sub> O)) Calkinsita ((Ce,La) <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> ·4(H <sub>2</sub> O)) Tengerita (Y <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> ·3(H <sub>2</sub> O)) Lokkaíta (CaY <sub>4</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>7</sub> ·9(H <sub>2</sub> O)) Hidromagnesita (Mg <sub>5</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> (OH) <sub>2</sub> ·4(H <sub>2</sub> O))

Tabla 6.2. Ejemplos de algunos carbonatos

### 6.4.1 Ácidos

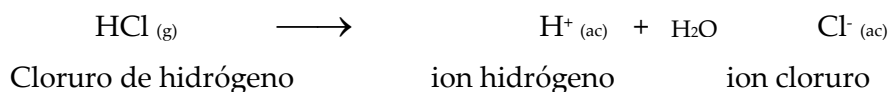
La palabra *ácido* proviene del latín y significa agrio, es un término que ha sido estudiado a lo largo de la historia. **Robert Boyle** fue un científico que nombró ácidos a las sustancias que poseen ciertas características, como el cambio de color que le producen al papel tornasol, el sabor agrio y la tendencia a corroer metales.



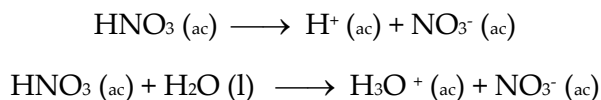


Posterior a esto, el químico sueco **Svante Arrhenius** retoma la clasificación de los ácidos y complementa el concepto, define a los ácidos como sustancias que producen un incremento en la concentración de iones  $H^+$  en las disoluciones acuosas.

El siguiente ejemplo muestra la formación de iones hidrógeno a partir de la reacción entre el cloruro de hidrógeno y el agua.



En el siglo XX, surge una definición más completa que no restringe los ácidos sólo en disoluciones acuosas, dado por los químicos **Johannes Bronsted** y **Thomas Lowry**, en la que definen que un ácido es aquella sustancia que es capaz de ceder iones hidrógeno, mientras que una base es capaz de aceptarlos. A continuación, se puede observar cómo el ácido nítrico genera iones hidrógeno, los cuales forman iones hidronio con las moléculas de agua.

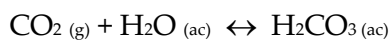


Posterior a esta definición surge el concepto del químico Gilbert N. Lewis, el cual define a un ácido como una sustancia capaz de aceptar un par de electrones, mientras que una base es aquella que puede cederlos.

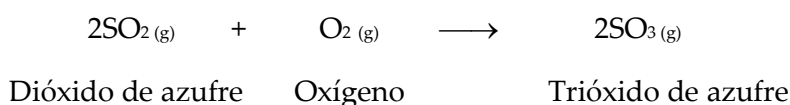
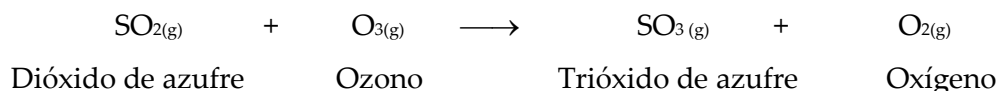
Como se mencionó anteriormente, existen una infinidad de reacciones que ocurren en la naturaleza y que dan origen a la formación de ácidos. Por ejemplo, la lluvia ácida contiene sustancias como el ácido sulfúrico ( $H_2SO_4$ ) y el ácido nítrico ( $HNO_3$ ). Este fenómeno causa deterioros ambientales, afectando los nutrientes del suelo, la vida que habita en los lagos, ríos, etc., hasta la corrosión de estructuras metálicas o de rocas.

Fenómenos naturales como las erupciones volcánicas emiten una gran cantidad de gases y ceniza volcánica, dando lugar a la formación de ácidos por las reacciones que ocurren entre los compuestos atmosféricos y los gases emitidos. Entre los gases más abundantes contenidos en el magma se encuentran el vapor de agua ( $H_2O$ ), dióxido de carbono ( $CO_2$ ), dióxido de azufre ( $SO_2$ ) y cloruro de hidrógeno ( $HCl$ ).

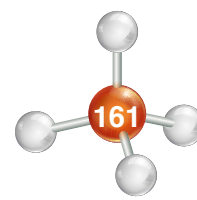
De estos, el dióxido de carbono ( $CO_2$ ) al reaccionar con el agua da origen al ácido carbónico, el cual se puede encontrar en pequeñas cantidades en la atmósfera.

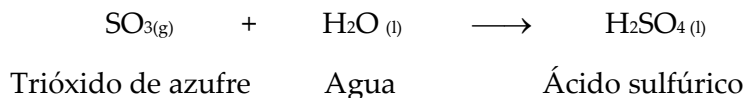


Otro ejemplo de reacción que ocurre con los gases emitidos en las erupciones volcánicas es el caso del dióxido de azufre ( $SO_2$ ), este gas al reaccionar con el ozono ( $O_3$ ) o con el oxígeno ( $O_2$ ) que se encuentran en la atmósfera, se oxida y da origen al trióxido de azufre  $SO_3$ .

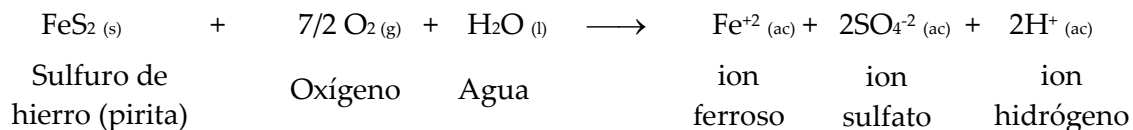


El trióxido de azufre reacciona con el agua dando origen el ácido sulfúrico ( $H_2SO_4$ ), el cual es un contaminante contenido en la lluvia ácida, como ya se indicó.

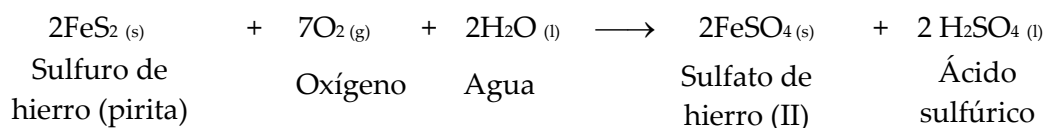




Además de fenómenos naturales existen reacciones ocasionadas por el hombre, como el drenaje ácido derivado de actividades relacionadas con la minería y que principalmente ocurren donde se extraen carbón y metales. En las minas subterráneas donde se explotan algunos yacimientos, es común encontrar minerales como la pirita ( $\text{FeS}_2$ ) (Figura 6.3), la cual al ser expuesta al agua subterránea ( $\text{H}_2\text{O}$ ) y al oxígeno ( $\text{O}_2$ ) ocasionarán su oxidación.



Para eventualmente formarse sulfato de hierro (II) ( $\text{FeSO}_4$ ) y ácido sulfúrico ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ).

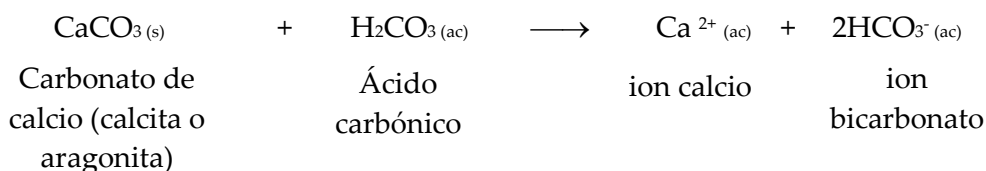


El drenaje ácido será entonces el agua con altas concentraciones de ácido sulfúrico, si está agua entra en contacto con los mantos freáticos ocasionará una fuente de contaminación, por ello representa uno de los principales problemas ambientales que genera la minería.



Figura 6.3 Pirita ( $\text{FeS}_2$ ). Colección mineralógica de la Facultad de Ingeniería, UNAM.

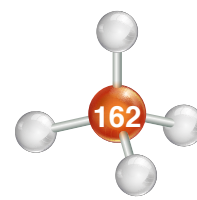
Los ácidos tienden a ser por lo tanto sustancias corrosivas que al contacto con algunos tipos de rocas que contienen minerales como la calcita o aragonita, de composición química  $\text{CaCO}_3$ , tienden a reaccionar produciendo daños en las rocas, un ejemplo muy visible es el deterioro que se produce en estatuas u objetos elaborados con rocas calizas o mármol.



En esta reacción, al disolverse el carbonato de calcio con el agua ácida se originan formaciones naturales como las cuevas o cavernas. Los iones se concentran en el agua subterránea generando lo que se conoce como agua dura, si está agua es calentada genera de nuevo el carbonato de calcio, al ser utilizada y pasar por tuberías genera problemas ya que se forma una capa de este carbonato en los calentadores o tuberías.

### 6.4.2 Bases

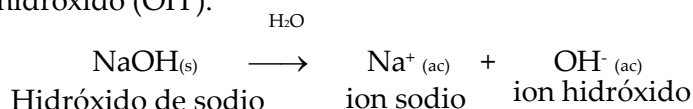
El término *base* significa en el inglés antiguo “ir hacia abajo”, esto quiere decir que su valor ha sido rebajado o disminuido, este significado tiene relación con los ácidos, ya que, al ser agregada una base, su valor con relación a la clasificación de ácidos en la escala de pH disminuye, es por ello por lo que adquieren este nombre. El científico **Robert Boyle** nombro álcalis a las bases, las



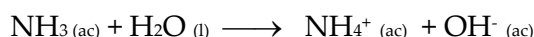


describió como resbaladizas y destacó el cambio de color que presentan ciertos colorantes al ponerse en contacto con ellas.

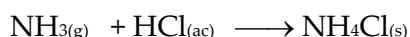
Posteriormente, el químico sueco **Svante Arrhenius** los define como sustancias que en disoluciones acuosas producen iones OH<sup>-</sup>. Un ejemplo lo constituye el hidróxido de sodio en agua, que produce iones hidróxido (OH<sup>-</sup>).



De acuerdo con el concepto ácido-base de Lewis, el amoníaco se comporta como una base, por el par de electrones libres que posee y que puede compartir:



En la naturaleza el amoníaco es una de las bases que reaccionan con los ácidos para dar lugar a reacciones de neutralización. Por ejemplo, el amoníaco reacciona con el ácido clorhídrico para dar lugar a una sal de amonio.

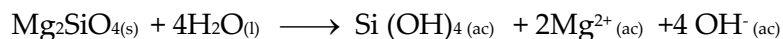


Una de las bases utilizadas en la industria de la construcción es el hidróxido de calcio Ca(OH)<sub>2</sub>, una forma para obtenerlo es a partir de la calcinación del CaCO<sub>3</sub> (contenido en las rocas calizas o de conchas orgánicas), que genera óxido de calcio (CaO), el cual reacciona con agua para producir hidróxido de calcio. La reacción se indica a continuación.



En rocas ígneas de composición ultramáfica, es decir, que se originan en el manto o en cumulos de un magma de origen mantélico (del manto), los minerales que las componen son ricos en Mg, como por ejemplo la peridotita del manto, komatiitas, o bien, en los basaltos o gabros de composición máfica (ricos en magnesio y hierro). El mineral forsterita (Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>) presente en este tipo de rocas, tiende a liberar iones por la meteorización que ocurre al reaccionar como base fuerte con el agua.

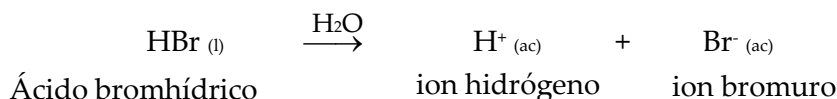
Como se observa, la disolución es fuertemente alcalina.



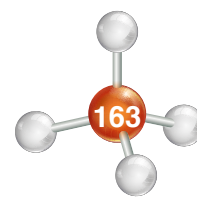
### 6.4.3 Ácidos y bases fuertes

Los ácidos y bases fuertes son aquellos que tienen la capacidad de estar completamente ionizados. A una sustancia que contiene iones inmersos en la disolución, se le conoce como electrólito, término que hace referencia a su capacidad de conducir la electricidad. Todos los ácidos y bases fuertes son electrólitos fuertes.

Por ejemplo, un ácido fuerte como el ácido bromhídrico, es un electrólito fuerte, ya que al disolverse en agua se ioniza totalmente en iones H<sup>+</sup> y Br<sup>-</sup>.



En las tablas 6.3 y 6.4 se muestran algunos ejemplos de ácidos y bases fuertes, así como una breve descripción de su aplicación en ciencias de la tierra.







ÁCIDOS FUERTES		Aplicación en ciencias de la tierra
HCl	Ácido Clorhídrico	Tratamiento de minerales o de zonas superficiales en los metales
HBr	Ácido Bromhídrico	Minería. Catalizador en la extracción de algunos minerales
HI	Ácido Yodhídrico	Refinación y limpieza de metales
HClO <sub>3</sub>	Ácido Clórico	Reactivo en laboratorios químicos
HClO <sub>4</sub>	Ácido Perclórico	Da origen a sales como el perclorato de amonio, ocupado para explosivos y propulsores.
HNO <sub>3</sub>	Ácido Nítrico	Síntesis de otros productos químicos, por ejemplo, explosivos
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	Ácido Sulfúrico	Proceso de lixiviación para separar los minerales del yacimiento. Frecuentemente utilizado en la minería del cobre

Tabla 6.3 Ejemplos de ácidos fuertes

			Usos	
BASES FUERTES	Hidróxidos de metales del grupo 1A	LiOH	Hidróxido de litio	Fabricación de sales de litio
		NaOH	Hidróxido de sodio	Elaboración de plásticos, jabones entre otros
		KOH	Hidróxido de potasio	Elaboración de jabón, blanqueador, entre otros
		RbOH	Hidróxido de rubidio	Investigación científica
		CsOH	Hidróxido de cesio	Catalizador
	Hidróxidos de metales pesados del grupo 2A	Ca(OH) <sub>2</sub>	Hidróxido de calcio	Tratamiento de aguas residuales y mejoramiento de tierras ácidas
		Sr(OH) <sub>2</sub>	Hidróxido de estroncio	Industria
		Ba(OH) <sub>2</sub>	Hidróxido de bario	Reactivo de laboratorio

Tabla 6.4 Ejemplos de bases fuertes

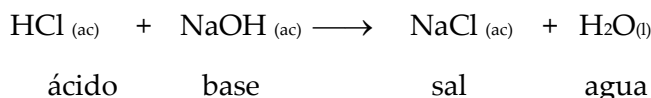
### 6.4.4 Reacciones de neutralización



Figura 6.4 Halita esqueletal  
Colección mineralógica  
"Andrés Manuel del Río"  
Facultad de Ingeniería,  
UNAM

Cuando reaccionan un ácido y una base dan origen a una reacción de neutralización donde se produce agua y una sal. Por ejemplo, la halita (Figura 6.4) es un mineral cuya composición química es NaCl, el agua de mar es un lugar donde se encuentran grandes concentraciones de halita. Cuando reaccionan el ácido clorhídrico (HCl) y la base hidróxido de sodio (NaOH), se forma una sal (NaCl) y agua (H<sub>2</sub>O).

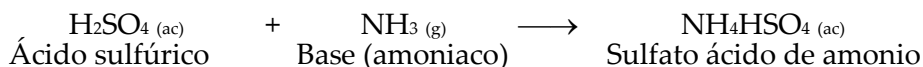
Este mineral es uno de los productos obtenidos en la siguiente reacción de neutralización.



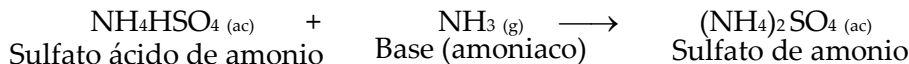


Otra reacción de neutralización ocurre con el amoníaco ( $\text{NH}_3$ ), esta sustancia se origina de manera natural por la descomposición de la materia orgánica presente en el suelo (desechos de animales, plantas, animales muertos, etc.), también puede ser obtenido por procedimientos químicos. Además, existe otra reacción de neutralización la cual se genera entre el amoníaco gaseoso y el ácido sulfúrico procedente de la atmósfera.

Esta reacción ocurrirá en dos etapas. La primera reacción es la siguiente:



Finalizando en la segunda etapa con la formación del sulfato de amonio:

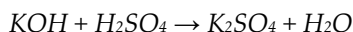


**PROBLEMA TIPO:**

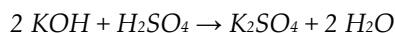
Una disolución de KOH que contiene 0.720 [g] de la base, se titula con una disolución 0.5 [M] de ácido sulfúrico. ¿Cuántos mililitros de la disolución de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  se utilizaron?

Solución:

El primer paso que considerar es la reacción que ocurrirá entre el hidróxido de potasio y el ácido sulfúrico, lo cual dará como resultado una sal que es el sulfato de potasio ( $\text{K}_2\text{SO}_4$ ) y agua ( $\text{H}_2\text{O}$ ).



Posterior a esto se realiza el balanceo de la ecuación:



Se obtiene la masa molar

Reacción:	2 KOH + H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> →		K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> +	2 H <sub>2</sub> O
masa molar (MM)	K= 39	H= (2)(1) = 2	K= (2) (39) = 78	H = (2)(1)
	O= 16	S = 32	S = 32	O = 16
	H= 1	O= (4) (16) =64	O = (4) (16) =64	
Total	56 [g]	98 [g]	174 [g]	18 [g]

\* Los pesos o masas moleculares están redondeados a números enteros sin cifras decimales.

Si se tienen 0.720 [g] de hidróxido de potasio (KOH) se debe de obtener el número de moles que esto representa:

$$\text{moles de KOH} = (0.720 \text{ [g]}) \left( \frac{1[\text{mol}] \text{ de KOH}}{56 \text{ [g]}} \right) = 12.9 \times 10^{-3} \text{ [moles] de KOH}$$

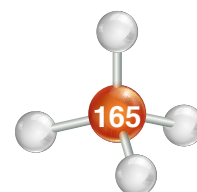
Dado que la ecuación balanceada indica que por cada 2 [moles] de KOH se requiere 1 [mol] de  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , la cantidad de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  debe ser la mitad del número de moles de (KOH), entonces para  $12.9 \times 10^{-3}$  [moles] de KOH se requieren  $6.45 \times 10^{-3}$  [moles] de  $\text{H}_2\text{SO}_4$ .

Por definición se sabe que la molaridad es:

$$\text{Molaridad} = [M] = \frac{\text{moles de soluto}}{\text{volumen de la disolución en litros}}$$

Entonces se tiene la concentración de la disolución de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  y los moles que se requieren para neutralizar a la base KOH, entonces de la ecuación anterior se puede despejar el volumen necesario de la disolución ácida.

$$\begin{aligned} \text{Volumen [l]} &= \frac{\text{moles de H}_2\text{SO}_4}{[M]} = \frac{6.45 \times 10^{-3} [\text{mol}]}{0.5 [M] \text{H}_2\text{SO}_4} = 12.9 \times 10^{-3} [\text{l}] \\ &= 12.9 \text{ [ml] de disolución } 0.5 [M] \text{ de H}_2\text{SO}_4 \end{aligned}$$





### 6.4.5 Escala de pH

En las reacciones ácido-base surge el concepto de *pH*, el cual significa potencial hidrógeno, y es una medida de la acidez o basicidad de una sustancia o disolución. El concepto surge en el siglo XX cuando el químico danés **Soren Peer Lauritz Sorensen** hace uso del término pH, hoy día es utilizado como medida de las concentraciones del ion  $H^+$ , el cual es el logaritmo negativo de la concentración del ion  $H^+$ . La manera en la que se calcula facilita su estudio, ya que antes de utilizarlo los números que resultaban de su medición eran tan pequeños que dificultaban su aplicación. El pH puede ser calculado de la manera siguiente:

$$pH = -\log [H^+]$$

Donde el corchete rectangular representa la concentración molar de los iones  $H^+$ .

Dependiendo del valor del pH obtenido para las disoluciones, éstas se clasifican en neutras, ácidas o básicas, esto es conocido como escla pH (figura 6.5).

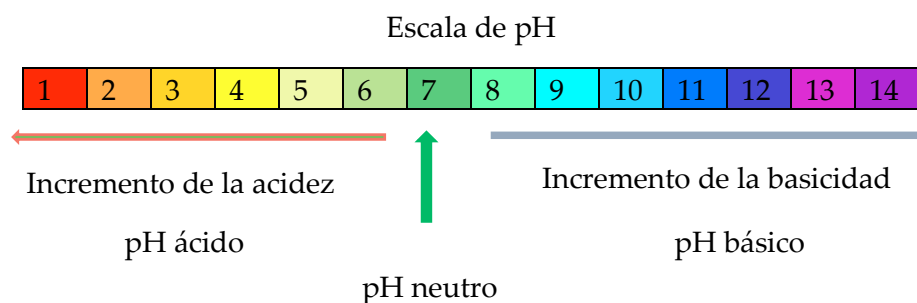


Figura 6.5. Escala de pH.

#### Disoluciones neutras

Para medir las concentraciones que existen de iones  $H^+$  en una disolución y determinar su acidez o basicidad, se establece que para que una reacción sea neutra en el agua pura a una temperatura de  $25^\circ C$ , las concentraciones de los iones  $H^+$  y  $OH^-$  deben ser iguales. Para que la reacción sea neutra el pH debe ser igual a 7, lo cual equivale a que las concentraciones, tanto de los iones hidrógeno, como de los iones hidróxido, sea de  $1 \times 10^{-7} [M]$ .

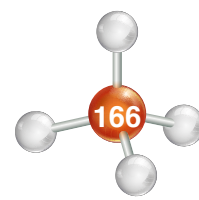
#### Disoluciones ácidas

Una disolución es ácida cuando la concentración de los iones hidrógeno en dicha disolución es mayor que  $1 \times 10^{-7} M$ . Por ejemplo, si se tiene una disolución cuyo valor de  $[H^+] = 1.0 \times 10^{-5} M$  el valor de pH será:

$$pH = -\log [H^+]; \quad pH = -\log [1 \times 10^{-5}]; \quad pH = -[-5] = 5$$

En otras palabras, una disolución es ácida cuando su valor de pH es menor de 7.0.

En cuanto a la lluvia ácida, ésta se considera como tal cuando su pH es menor de 5.6, ya que este valor se alcanza exclusivamente debido al equilibrio químico que se establece entre el dióxido de carbono de la atmósfera y el agua de lluvia. En otras palabras, el valor del pH neutro para la lluvia se considera como 5.6 y no como 7



**PROBLEMA TIPO:**

De acuerdo con estudios realizados se sabe que en las salmueras geotérmicas el pH es neutro o ligeramente ácido. Considerando que al realizar el estudio se obtuvo un pH de 6.1. Calcule la concentración de los iones  $H^+$  en la salmuera.

*Solución:*

*Si se conoce el pH y lo que se busca es el valor de los iones  $[H^+]$ , de la fórmula del pH se despeja este valor, entonces se tiene:*

$$pH = -\log [H^+]$$

$$[H^+] = 10^{-pH}$$

$$pH = -\log [H^+]$$

$$\log [H^+] = 6.1$$

$$[H^+] = 10^{-6.1}$$

$$[H^+] = 7.94 \times 10^{-7} [M^*]$$

*Como ya se mencionó, para una disolución ácida la cantidad de iones  $[H^+] > 1.0 \times 10^{-7} [M]$  y su  $pH < 7.00$  y para una disolución neutra la cantidad de iones  $[H^+] = 1.0 \times 10^{-7} [M]$  y la medida del  $pH = 7.00$ . De acuerdo con el resultado obtenido se trata de una disolución ácida.*

\*la concentración molar se representa como  $[M]$  y equivale a  $[mol/l]$  en unidades del SI.

**Disoluciones básicas**

Una disolución será básica cuando la concentración de los iones hidrógeno sea menor que  $1 \times 10^{-7} M$ . Por ejemplo, si encontramos una disolución cuyo valor de  $[H^+] = 1.0 \times 10^{-12} M$  el valor de pH será:

$$pH = -\log [H^+]$$

$$pH = -\log [1 \times 10^{-12}]$$

$$pH = -[-12] = 12$$

Que es mayor que 7.

La escala de pOH

Se obtiene con el logaritmo negativo de la concentración de iones  $OH^-$ .

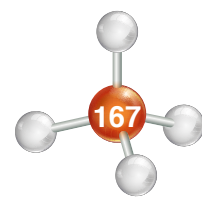
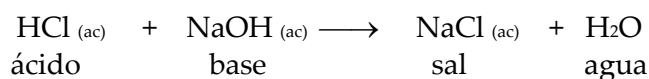
$$pOH = -\log [OH^-]$$

Al despejar la concentración de iones hidróxido de la ecuación anterior, se obtiene:

$$[OH^-] = 10^{-pOH}$$

**PROBLEMA TIPO:**

En la siguiente reacción de neutralización se ponen a reaccionar 10 [ml] de  $HCl$  2[M] con 6 [ml] de  $NaOH$  1[M]. Calcule el pH final de la disolución final.





Solución:

Se realiza el despeje de los moles de soluto (n):

$$2[M] = \frac{n(\text{HCl})}{0.01 [l]} \quad n(\text{HCl}) = 2[M] \times 0.01 [l] = 2 [g/l] \times 0.01[l] = 0.02 [mol]$$

$$1[M] = \frac{n(\text{NaOH})}{0.006 [l]} \quad n(\text{NaOH}) = 1[M] \times 0.006 [l] = 1 [g/l] \times 0.06[l] = 0.006 [mol]$$

$$n(\text{HCl}) > n(\text{NaOH})$$

De la diferencia entre los moles de soluto del ácido clorhídrico y los moles de soluto del hidróxido de sodio se obtienen los moles de soluto de ácido clorhídrico sin reaccionar.

$$n(\text{HCl})_{\text{sin Rx}} = n(\text{HCl}) - n(\text{NaOH}) = 0.02[mol] - 0.006[mol] = 0.014 [mol]$$

El número de moles de HCl sin reaccionar es igual al número de moles del ion  $\text{H}^+$ , ya que el ácido es fuerte,  $\text{HCl} \longrightarrow \text{H}^+ + \text{Cl}^-$

$$\text{Se calcula la molaridad } [M] = \frac{n(\text{H}^+)}{0.01[l] + 0.006 [l]} = \frac{0.014}{0.016 [l]} = 0.875$$

$$\text{pH} = -\log [M] = -\log [0.875] = 0.05799$$

## 6.5 Cálculos estequiométricos: reactivos limitantes y en exceso, rendimientos teórico, experimental y porcentual

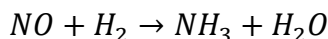
### 6.5.1 Métodos de balanceo de ecuaciones químicas

#### Método por tanteo

Este método consiste en modificar los coeficientes de la ecuación química (reactivos y productos), observando que el número de átomos presentes sea non y al finalizar sean par.

#### PROBLEMA TIPO:

Balancear la siguiente ecuación por el método de tanteo:

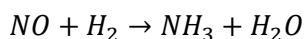


Estrategia de solución:

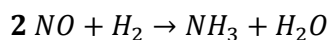
Observar que reactivos y productos estén compuestos por átomos non.

Colocar un coeficiente sencillo par y ajustar la ecuación para que se cumpla la ley de la conservación de la materia.

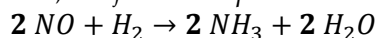
Solución:



Se puede colocar un 2 a NO o  $\text{NH}_3$



Como se tienen 2 átomos de N y 2 de O, se ajustan los productos a esos mismos valores.



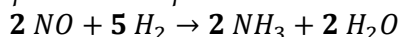
Ahora se tiene

N	2 en reactivos y 2 en productos
O	2 en reactivos y 2 en productos
H	2 en reactivos y 10 en productos





Ajustando la ecuación, se observa que se tienen que balancear los hidrógenos.



N	2 en reactivos y 2 en productos
O	2 en reactivos y 2 en productos
H	10 en reactivos y 10 en productos

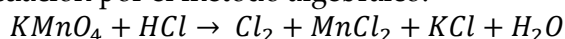
Finalmente, la ecuación queda balanceada.

### Método algebraico

A cada elemento o compuesto de la ecuación química se le asigna una letra como coeficiente.

#### PROBLEMA TIPO:

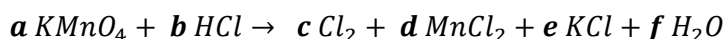
Balancear la siguiente ecuación por el método algebraico.



Estrategia de solución:

1. Se asigna una letra a cada elemento o compuesto en la ecuación química.
2. Se forman ecuaciones matemáticas con los coeficientes literales.
3. Se resuelve el sistema de ecuaciones.

Solución:



1. Propuesta de ecuaciones matemáticas:

Balance de K:  $a=e \dots$  (ec. 1)

Balance de Mn:  $a=d \dots$  (ec. 2)

Balance de O:  $4a=f \dots$  (ec. 3)

Balance de H:  $b=2f \dots$  (ec.4)

Balance de Cl:  $b=2c+2d+e \dots$ (ec.5)

2. Resolución del sistema:

Si  $a = 1$

Sustituyendo  $a$  en ec. 1, ec. 2, ec. 3 y ec. 4

$$e = 1, d = 1, f = 4, b = 8$$

Sustituyendo  $b, d$  y  $e$  en ec.5

$$8 = 2c + 2 + 1$$

$$2c = 8 - 2 - 1$$

$$2c = 5$$

$$c = \frac{5}{2}$$

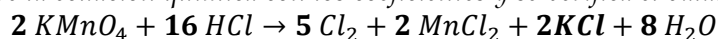
Valores de las literales:

$$a = 1, b = 8, c = \frac{5}{2}, d = 1, e = 1 \text{ y } f = 4$$

Para obtener números enteros se multiplican todas las literales por 2

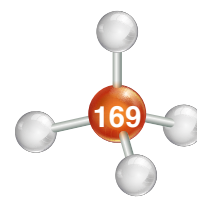
$$a = 2, b = 16, c = 5, d = 2, e = 1 \text{ y } f = 8$$

Finalmente Se escribe la ecuación química con los coeficientes y se verifica el balanceo.



K	2 en reactivos y 2 en productos
Mn	2 en reactivos y 2 en productos
O	8 en reactivos y 8 en productos
H	16 en reactivos y 16 en productos
Cl	16 en reactivos y 16 en productos

La ecuación queda balanceada.





## 6.5.2 Reactivos limitantes y en exceso

### Reactivo limitante

El *reactivo limitante* es aquel que se encuentra en menor cantidad estequiométrica en la reacción química. La cantidad que reacciona del reactivo limitante determina tanto la cantidad de productos formados como la de reactivos utilizados en la reacción.

### Reactivo en exceso

El *reactivo en exceso* es aquella sustancia que se consume parcialmente en una reacción química.

#### PROBLEMA TIPO:

La reacción entre aluminio y ácido clorhídrico produce cloruro de aluminio e hidrógeno. Si reaccionan 18 g de Al con 120 g de HCl.

- ¿Cuál es el reactivo limitante?
- ¿Qué masa sobra del reactivo en exceso?

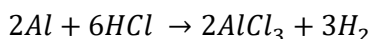
Reacción que se lleva a cabo:  $Al + HCl \rightarrow AlCl_3 + H_2$

Estrategia de solución:

- Balancear la ecuación química, si no lo estuviera.
- Transformar la masa de reactivos a número de moles.
- Identificar el reactivo limitante con base en los números de moles involucrados en la ecuación balanceada y los números de moles de reactivos con los que se cuenta.
- Calcular cuánto sobra del reactivo en exceso.

Solución:

- Ecuación balanceada.



Número de moles de aluminio:

$$n_{Al} = \frac{18 [g]}{27 \left[ \frac{g}{mol} \right]} = 0.667 [mol]$$

Número de moles de ácido clorhídrico:

$$n_{HCl} = \frac{120 [g]}{36.5 \left[ \frac{g}{mol} \right]} = 3.288 [mol]$$

Como se observa en la ecuación química balanceada, 2 moles de Al reaccionan con 6 moles de HCl, por lo tanto, el número de moles de Al que reaccionarán con 3.288 moles de HCl serán:

$$n_{Al} = 3.288 \text{ moles HCl} \left( \frac{2 \text{ moles de Al}}{6 \text{ moles de HCl}} \right) = 1.096 \text{ moles de Al}$$

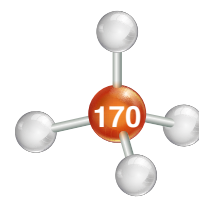
Sin embargo, sólo se cuentan con 0.667 moles de Al, éste es el reactivo limitante, ya que se tiene menor cantidad de lo que se requiere para reaccionar con todo el HCl.

- Ya que el reactivo en exceso es el HCl, primero se determinará el número de moles de esta sustancia que reacciona con todo el Al presente.

$$n_{HCl} = 0.667 \text{ moles de Al} \left( \frac{6 \text{ moles de HCl}}{2 \text{ moles Al}} \right) = 2.001 \text{ moles de HCl}$$

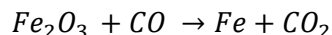
Por lo tanto, el número de moles de HCl en exceso es:  $(3.288 - 2.001) \text{ moles} = 1.287 \text{ moles}$ , que

corresponde a una masa de:  $m_{HCl} = 1.287 \text{ moles HCl} \left( \frac{36.5 [g]_{HCl}}{1 [mol]_{HCl}} \right) = 46.98 [g] \text{ de HCl}$



**PROBLEMA TIPO:**

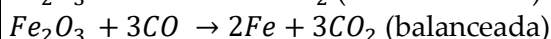
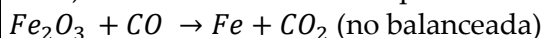
En algunos procesos metalúrgicos, la reducción del óxido férrico se realiza mediante su reacción con monóxido de carbono.



Si se hacen reaccionar 2.5 moles de óxido férrico, con 130 g de monóxido de carbono, determine el número de moles de dióxido de carbono que se obtienen.

Estrategia de solución:

- 1) Balancear la ecuación química:

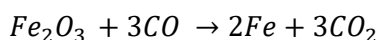


- 2) Revisar que las unidades sean las mismas (g, mol, etc.)

- 3) Realizar los cálculos pertinentes.

Solución:

Ecuación balanceada:



Considerando las 2.5 moles de  $Fe_2O_3$ :

1 [g mol]  $Fe_2O_3$  reacciona con 84 [g] CO

$$m_{CO} = 2.5[\text{mol}]Fe_2O_3 \times \frac{84[\text{g}]deCO}{1[\text{mol}]Fe_2O_3} = 210[\text{g}]$$

Se observa que para 2.5 [mol] de  $Fe_2O_3$ , se requiere 210 [g] de CO, y sólo se cuenta con 130 [g] de CO, por lo tanto, se tiene menos de lo que se necesita y el reactivo limitante es el CO y el reactivo en exceso es  $Fe_2O_3$ .

El número de moles de  $CO_2$  es:

$$n_{CO_2} = 130[\text{g}]CO \times \frac{3[\text{mol}]deCO_2}{84[\text{g}]CO} = 4.642[\text{mol}]$$

## Rendimiento porcentual

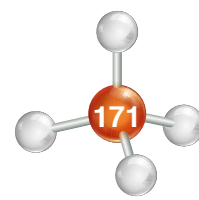
El *rendimiento porcentual* es un parámetro que indica cuánto se obtuvo realmente de un producto respecto a lo esperado teóricamente.

Se expresa de la siguiente manera:

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{\text{rendimiento real o experimental}}{\text{rendimiento teórico}} \times 100$$

## Rendimiento teórico

Es la cantidad que se debería obtener de productos, calculada a partir de la ecuación balanceada.





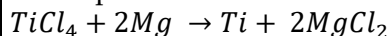
## Rendimiento real o experimental

Es la cantidad real obtenida. Tanto el rendimiento real o experimental, como el teórico, se pueden expresar en términos de masa, número de moles, volumen, o cualquier otra cantidad física que se pueda determinar experimentalmente.

El rendimiento real es menor que el rendimiento teórico, ya que durante la reacción química hay pérdidas de sustancias, debido a la manipulación de las mismas.

### PROBLEMA TIPO:

En un proceso industrial se obtiene titanio a partir de la siguiente reacción:



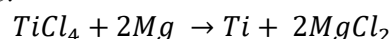
Calcule el porcentaje de rendimiento de la reacción, si se obtienen  $7.91 \times 10^6$  [g] de Ti, a partir de  $3.54 \times 10^7$  [g] de  $TiCl_4$ .

Estrategia de solución:

1. Balancear la ecuación química, si no lo estuviera.
2. Calcular el rendimiento teórico a partir de la reacción química donde se establecen las relaciones estequiométricas para encontrar cuanto Ti se forma a partir de  $3.54 \times 10^7$  [g] de  $TiCl_4$ .
3. Calcular el porcentaje de rendimiento.

Solución:

La ecuación química balanceada es:



Los factores de conversión son:

$$\left( \frac{1 \text{ mol } TiCl_4}{190 \text{ [g]} TiCl_4} \right) \text{ y } \left( \frac{48 \text{ [g]} Ti}{1 \text{ mol } Ti} \right)$$

Rendimiento teórico:

$$3.54 \times 10^7 \text{ [g]} TiCl_4 \left( \frac{1 \text{ mol } TiCl_4}{190 \text{ [g]} TiCl_4} \right) \left( \frac{1 \text{ mol } Ti}{1 \text{ mol } TiCl_4} \right) \left( \frac{48 \text{ [g]} Ti}{1 \text{ mol } Ti} \right) = 8.94 \times 10^6 \text{ [g]} Ti$$

Porcentaje de Rendimiento:

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{\text{rendimiento real o experimental}}{\text{rendimiento teórico}} \times 100$$

Sustituyendo valores:

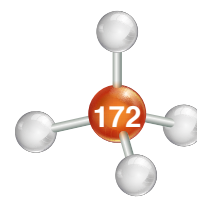
$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{7.91 \times 10^6 \text{ [g]} Ti}{8.94 \times 10^6 \text{ [g]} Ti} \times 100 \% = 88.47\%$$

### PROBLEMA TIPO:

Un mineral pobre en cobre contiene 8.62% de  $Cu_2S$  en masa, ¿Cuántas toneladas de cobre pueden obtenerse de 250 toneladas del mineral mediante un proceso de conversión cuya eficiencia es del 78%?

La reacción que se lleva a cabo en el proceso es:  $Cu_2S + O_2 \xrightarrow{\Delta} Cu + SO_2$

Estrategia de solución:

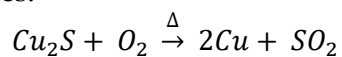




1. Balancear la ecuación química, si no lo estuviera.
2. Calcular la cantidad de  $Cu_2S$  hay en una tonelada de mineral.
3. Calcular las toneladas de cobre a partir de las toneladas de  $Cu_2S$ .
4. Calcular el rendimiento real.

Solución:

La ecuación química balanceada es:



Factor de conversión:  $\frac{0.0862 [ton] Cu_2S}{1 [ton] de mineral}$

Entonces :  $250 [ton] de mineral \left( \frac{0.0862 [ton] Cu_2S}{1 [ton] de mineral} \right) = 21.55 [ton] Cu_2S$

$$21.55 [ton] Cu_2S \left( \frac{1 [t mol] Cu_2S}{160 [ton] Cu_2S} \right) \left( \frac{2 [t mol] Cu}{1 [t mol] Cu_2S} \right) \left( \frac{64 [ton] Cu}{1 [t mol] Cu} \right) = 17.2 ton$$

Por lo que si 21.55 Ton de  $Cu_2S$  producen 17.2 Ton de Cu, el rendimiento teórico es 17.2 [ton], y ya que el % de Rendimiento es 78%, se despeja de la fórmula el de rendimiento real.

$$Rendimiento real = \frac{78\% \times 17.2 [ton]}{100\%} = 13.416 [ton] de Cu$$

## 6.6 La fase gaseosa y la ecuación del gas ideal

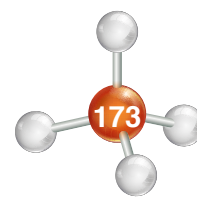
La razón del estudio de los gases en un curso de Química radica en el hecho de que en muchas de las reacciones químicas se consumen o se producen sustancias que existen en esta fase y, en consecuencia, es importante conocer, entre otras cosas, la masa o el número de moles que existen de tales sustancias bajo ciertas condiciones de presión, temperatura y volumen.

El término gas deriva de la palabra griega  $\chi\acute{\alpha}\omicron\varsigma$  (khaos) que significa caos, lo cual hace referencia a un movimiento caótico y desordenado que caracteriza a los átomos o moléculas que conforman a una sustancia que se encuentra en dicha fase. Se sabe que los gases presentan ciertas propiedades muy características:

- 1.- Ocupan el volumen del recipiente que lo contiene. Por ello hablar del volumen de un gas es equivalente a hablar del volumen del recipiente donde se aloja.
- 2.- Se comprimen fácilmente. Esta propiedad se pone de manifiesto, por ejemplo, en el funcionamiento de un motor de ignición por chispa.
- 3.- Gran diferencia en volumen comparado con el de los sólidos o líquidos. Gracias a esta característica es que podemos disfrutar de las palomitas de maíz en una función de cine.

Es muy común que cuando se realizan cálculos estequiométricos en química, que involucran gases, se asuma que éstos se comportan como ideales. Algunas consideraciones que se deben cumplir para considerar al gas como tal, son:

- a) Que el volumen de los átomos o moléculas que conforman el gas sea despreciable comparado con el volumen del recipiente que lo contiene. Esto se puede verificar al condensar el gas y comparar el volumen del líquido formado con el volumen del recipiente.







b) Las colisiones entre átomos o moléculas son elásticas (e igual con las paredes del recipiente); es decir, durante los choques no hay pérdida de energía.

c) La energía cinética media de los átomos o moléculas en el gas es proporcional a la temperatura absoluta.

Las consideraciones anteriores llevan a la conclusión de que un gas se comporta como ideal cuando existe a muy bajas presiones. Hay que tomar en cuenta, sin embargo, que el modelo del gas ideal constituye una situación hipotética, ya que con seguridad al menos una de las consideraciones anteriores no se satisfará. Sin embargo, por otra parte, la aplicación de la ecuación del gas ideal ha demostrado su utilidad en el análisis y tratamiento de procesos que involucran gases, siempre y cuando no se alejen demasiado de la "idealidad".

Las principales leyes que describen el comportamiento de los gases ideales se indican a continuación:

1.- **Ley de Boyle:** Establece la relación que existe entre el volumen de un gas y su presión, manteniendo la temperatura constante. Dicha ley se expresa de la manera siguiente:

*"En un proceso isotérmico, la presión de un gas es inversamente proporcional a su volumen"*

Una gráfica que describe tal comportamiento se muestra a continuación (Figura 6.6).

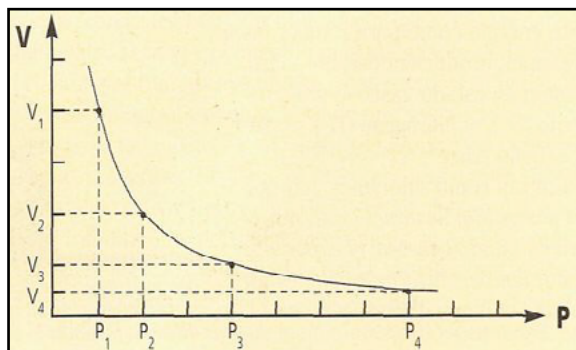


Fig.6.6. Gráfica (P vs V) "Ley de Boyle". Tomada de [https://historiaybiografias.com/los\\_gases/](https://historiaybiografias.com/los_gases/)

Este comportamiento puede expresarse mediante la ecuación:

$P_1V_1 = P_2V_2 = \dots = P_nV_n = k$ ; donde k es una constante que depende de la temperatura. Esta ecuación se puede describir simplemente como:  $PV = k$

2.- **Ley de Charles:** Establece que el volumen de un gas a presión constante aumenta linealmente con la temperatura del gas. Una gráfica (Figura 6.7) de dicho comportamiento se indica a continuación:

La ecuación que describe dicho comportamiento es:

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2} = \dots = \frac{V_n}{T_n} = k'; \text{ o}$$

$$\text{simplemente, } \frac{V}{T} = k';$$

donde k' es una constante de proporcionalidad que depende de la presión.

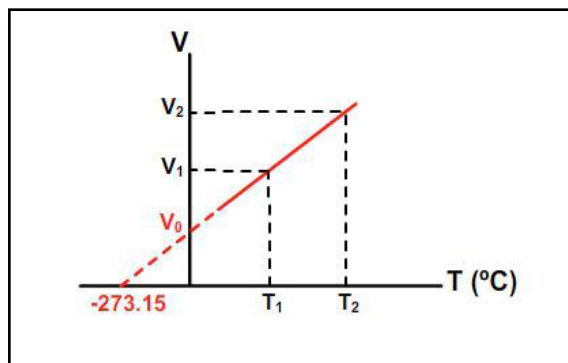


Fig. 6.7. Gráfica (T vs V) Ley de Charles. Tomada de <http://lascienciasfundamentales.blogspot.mx/2016/10/ley-de-charles.html>



3.- **Ley de Avogadro:** Esta ley establece que volúmenes iguales de gases diferentes a la misma presión y temperatura contienen el mismo número de partículas, o bien, para un gas a temperatura y presión constantes, el volumen es directamente proporcional al número de moles del gas. Matemáticamente este enunciado se puede escribir, como:

$$V = k'' n$$

Donde V es el volumen del gas, n, es el número de moles, y k'', es una constante de proporcionalidad.

Las relaciones anteriormente indicadas pueden combinarse en una sola ecuación, la cual se conoce simplemente como la ecuación del gas ideal:

$$PV = nR_u T$$

Donde  $R_u$  es la constante universal de los gases, cuyo valor en el Sistema Internacional de Unidades es  $8314 \frac{J}{kg mol K}$ . Vale la pena indicar que el valor que se utiliza con mayor frecuencia en los cálculos químicos donde interviene la constante universal es:  $0.082 \frac{atm L}{K mol}$ .

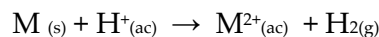
La ecuación de los gases ideales representa una ecuación de estado, donde si el gas se encuentra confinado en un sistema cerrado, el conocimiento de dos de las tres propiedades permite la determinación de la tercera, a partir de dicha ecuación.

Finalmente, hay que mencionar que, si un gas se encuentra confinado en un recipiente, y sufre un proceso determinado, la ecuación de gas ideal se puede expresar de la manera siguiente, entre un estado termodinámico y otro.

$$\frac{P_1 V_1}{T_1} = \frac{P_2 V_2}{T_2} ; \text{ o bien, } \frac{PV}{T} = C; \text{ donde } C \text{ es una constante.}$$

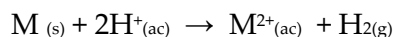
#### PROBLEMA TIPO:

Identifique el metal desconocido que aparece en la siguiente ecuación química, si una muestra de 1 [g] del metal reacciona totalmente con un exceso de ácido y produce 374 [ mL ] de  $H_2$  gaseoso a  $25[^\circ C]$  y 1 [atm].



Estrategia de solución:

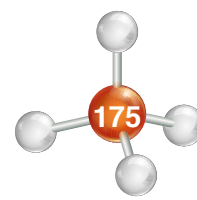
1. Como primer paso se debe balancear la ecuación química.

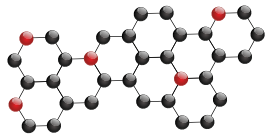


2. Con los datos de la presión, el volumen y la temperatura, se calcula el número de moles de hidrógeno que se generan a partir de la ecuación del gas ideal:

$$n = \frac{PV}{R_u T} = \frac{1 atm (0.374 [ L ])}{0.082 \frac{atm L}{K mol} (298.15 K)} = 1.5298 \times 10^{-2} mol$$

Solución:





Solución:

Ya que, según la estequiometría de la reacción, y debido al hecho de que el metal reacciona en su totalidad, 1 mol de hidrógeno se obtiene al reaccionar 1 mol del metal; por lo tanto, el número de moles del metal que reaccionaron es también de  $1.5298 \times 10^{-2}$  mol.

La identificación del metal se logra a través del cálculo de su masa molar, mediante la siguiente expresión:

$$n = \frac{m}{M} ; M = \frac{m}{n} = \frac{1 [g]}{1.5298 \times 10^{-2} \text{ mol}} = 65.37 \left[ \frac{g}{\text{mol}} \right]$$

Mediante la consulta en la tabla periódica, se observa que se trata de cinc metálico (Zn).

## 6.7 Unidades de concentración

El término concentración es utilizado en química para conocer la cantidad de soluto que existe en una determinada cantidad de disolución y para esto se utilizan diferentes unidades de concentración. Algunas de ellas son: molaridad o concentración molar, porcentaje masa/masa, porcentaje masa/volumen, porcentaje volumen/volumen, fracción molar, partes por millón, entre otras.

### 6.7.1 Molaridad o concentración molar

La **molaridad** es el número de moles de soluto que hay en un litro de disolución.

$$\text{Molaridad} = \frac{\text{moles de soluto}}{\text{volumen de la disolución en litros}} , M = \frac{n}{v}$$

Donde: M= molaridad  
n= número de moles de soluto  
v= volumen de la disolución en litros

Por ejemplo, se tiene una disolución del mineral halita (NaCl), la cual contiene 0.750 moles de cloruro de sodio (NaCl) en 500 [ml] de disolución. Su molaridad será:

$$\text{Molaridad} = \frac{\text{moles de soluto}}{\text{volumen de la disolución en litros}}$$

$$M = \frac{n}{v}$$

$$M = \frac{0.750 [\text{mol}] \text{ de NaCl}}{0.5 [\text{l}] \text{ disolución}}$$

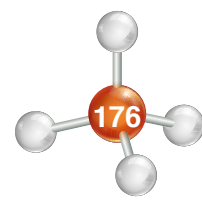
$$M = 1.5 \text{ M de NaCl}$$

Lo que significa que en cada litro de disolución hay 1.5 moles de cloruro de sodio.

### 6.7.2 Porcentaje masa/masa (% m/m)

Es la relación porcentual que existe entre la masa del soluto y la masa de la disolución.

$$\text{porcentaje en masa} = \frac{\text{masa de soluto [g]}}{\text{masa de soluto [g]} + \text{masa del disolvente [g]}} \times 100\%$$





$$\text{porcentaje en masa} = \frac{\text{masa de soluto [g]}}{\text{masa de la disolución [g]}} \times 100\%$$

$$\%m/m = \frac{\text{masa de soluto [g]}}{\text{masa de la disolución [g]}} \times 100\%$$

Por ejemplo, se tienen 0.250 [g] de sulfuro de hierro y éste se disuelve en 88.5 [g] de agua (H<sub>2</sub>O) ¿Cuál es el porcentaje en masa del sulfuro de hierro en la disolución?

$$\text{porcentaje en masa} = \frac{\text{masa de soluto}}{\text{masa de la disolución}} \times 100\%$$

$$\%m/m = \frac{0.250 \text{ [g]}}{0.250 \text{ [g]} + 88.5 \text{ [g]}} \times 100\%$$

$$\%m/m = 0.28 \%$$

### 6.7.3 Porcentaje masa/volumen (%m/v)

Es la relación porcentual que existe entre la masa del soluto en gramos y el volumen de la disolución en mililitros.

$$\text{porcentaje masa/volumen} = \frac{\text{masa de soluto}}{\text{volumen de la disolución}} \times 100\%$$

$$\%m/v = \frac{m \text{ [g]}}{v \text{ [ml]}} \times 100\%$$

Por ejemplo, se tiene una disolución de 900 [ml] compuesta de sacarosa (C<sub>12</sub>H<sub>22</sub>O<sub>11</sub>) y agua (H<sub>2</sub>O), en la cual el porcentaje masa/volumen es del 25%. Calcule la cantidad de gramos de sacarosa (C<sub>12</sub>H<sub>22</sub>O<sub>11</sub>) que tendrá esta disolución.

$$\text{porcentaje masa/volumen} = \frac{\text{masa de soluto}}{\text{volumen de la disolución}} \times 100\%$$

Se despeja la masa de soluto

$$\text{masa de soluto} = \frac{\text{porcentaje} \frac{\text{masa}}{\text{volumen}} \times \text{volumen de la disolución}}{100\%}$$

$$\text{masa de soluto (sacarosa)} = \frac{25\% \times 900 \text{ [ml]}}{100\%}$$

$$\text{masa de soluto (sacarosa)} = 225 \text{ [g]}$$

### 6.7.4 Porcentaje volumen/volumen (%v/v)

Es la relación porcentual entre el volumen del soluto respecto al volumen de la disolución, ambas expresiones dadas en mililitros.

$$\text{porcentaje volumen/volumen} = \frac{\text{volumen de soluto [ml]}}{\text{volumen de la disolución [ml]}} \times 100\%$$

$$\%v/v = \frac{\text{volumen de soluto [ml]}}{\text{volumen de la disolución [ml]}} \times 100\%$$

Por ejemplo, el vinagre es una mezcla de ácido acético (CH<sub>3</sub>COOH) en agua (H<sub>2</sub>O) con una concentración del 5% v/v, determine la cantidad de ácido en 950 ml de vinagre.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

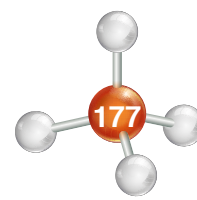
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





$$\%v/v = \frac{\text{volumen de soluto [ml]}}{\text{volumen de la disolución [ml]}} \times 100\%$$

$$5\%v/v = \frac{\text{volumen de soluto [ml]}}{950 \text{ [ml]}} \times 100\%$$

Despejando

$$\text{volumen de soluto (ácido acético)} = \frac{(5\%)(950 \text{ [ml]})}{100\%}$$

$$\text{volumen de soluto(ácido acético)} = 47.5 \text{ [ml]}$$

La cantidad de ácido acético en 950 ml de vinagre es de 47.5 [ml].

### 6.7.5 Fracción molar

Representa la relación del número de moles de un componente con relación al número de moles de todos los componentes. La fracción molar no tiene unidades.

$$\text{Fracción molar del componente A} = X_A = \frac{\text{moles de A}}{\text{suma de los moles de todos los componentes}}$$

### 6.7.6 Partes por millón (ppm)

En disoluciones que contienen una cantidad muy pequeña de soluto, las unidades de partes por millón (ppm) son muy utilizadas. Esta unidad se define como:

$$\text{ppm del componente} = \frac{\text{masa del componente en la disolución [g]}}{\text{masa total de la disolución [g]}} \times 10^6$$

Esto se puede visualizar de la siguiente manera: Si se tiene una disolución de cierta sustancia, con una concentración de 1 ppm, esto querrá decir que posee un gramo de soluto por cada millón de gramos de disolución.

Por ejemplo, el arsénico (As) es un elemento tóxico frecuente en la contaminación de las aguas subterráneas. Se desea evaluar su impacto por lo que se mezclan 0.0005 [g] de arsénico con 1.5 [kg] de agua. Las partes por millón del contaminante son:

$$\text{ppm} = \frac{0.0005 \text{ [g] (As)}}{0.0005 \text{ [g] (As)} + 1500 \text{ [g] (H}_2\text{O)}} \times 10^6$$

$$\text{ppm de arsénico (As)} = 0.333$$

#### PROBLEMA TIPO:

En el proceso de lixiviación de un cierto mineral se utilizaron 35.8 [g] de ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) para preparar 800 [ml] de disolución. Calcule la molaridad de la disolución. Considere que el ácido sulfúrico proviene de una disolución al 98% en masa de ácido sulfúrico.

Solución:

$$\text{Molaridad} = \frac{\text{moles de soluto}}{\text{volumen de la disolución en litros}}$$

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

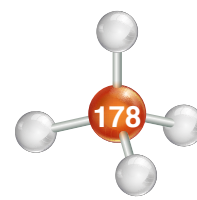
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22







Se necesita obtener el número de moles de ácido sulfúrico ( $H_2SO_4$ ), para ello se calcula su masa molar. Sumamos las masas atómicas de los átomos del ácido sulfúrico ( $H_2SO_4$ )

$(H_2SO_4)$	Masas atómicas
2 átomos de H	$2 (1.008 [uma]) = 2.016 [uma]$
1 átomo de S	$32.07 [uma]$
4 átomos de O	$4 (16 [uma]) = 64.00 [uma]$
suma de las masas atómicas	$98.086[uma]= 98.086 [g]$

Una vez obtenida la masa molar se obtiene el número de moles de  $H_2SO_4$ , para ello se calcula el 98% de los 35.8 [g] de ácido sulfúrico ( $H_2SO_4$ ) que se ocuparon.

$$\text{Cantidad de [g] de } (H_2SO_4) = (98\% ) \left( \frac{35.8 [g]}{100\%} \right) = 35.084 [g]$$

$$\text{Núm. de moles } (H_2SO_4) = (35.084 [g] (H_2SO_4)) \left( \frac{1 \text{ mol } (H_2SO_4)}{98.086 [g] (H_2SO_4)} \right)$$

$$\text{Núm. de moles } (H_2SO_4) = 0.358$$

$$35.084 [g] H_2SO_4 = 0.358 \text{ mol } H_2SO_4$$

Ahora con la ecuación:

$$M = \frac{n}{v}; \quad M = \frac{0.358 \text{ mol de } H_2SO_4}{0.8 [l] \text{ disolución}}$$

$$M = 0.44 \text{ M } H_2SO_4$$

**PROBLEMA TIPO:**

Se tiene una disolución con un volumen en de 100 [ml], compuesta de ácido sulfúrico ( $H_2SO_4$ ) y agua ( $H_2O$ ), con un contenido de 15% masa/volumen en ácido sulfúrico. Calcule la cantidad de gramos de ( $H_2SO_4$ ) que tendrá esta disolución ¿Cuál es la fracción molar del  $H_2SO_4$  en la disolución? Considere una densidad de 1840 [kg/m<sup>3</sup>] para el  $H_2SO_4$  puro.

Solución:

Se tienen los datos del porcentaje en masa/volumen y el volumen. Se despeja para obtener la cantidad de gramos de ( $H_2SO_4$ ).

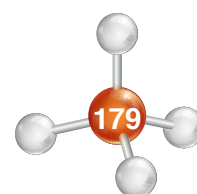
$$\text{porcentaje masa/volumen} = \frac{\text{masa de soluto}}{\text{volumen de la disolución}} \times 100\%$$

$$15\% \text{ m/v} = \frac{\text{masa de } (H_2SO_4)}{100 [ml]} \times 100\%$$

$$\text{masa de } (H_2SO_4) = (15\%) \left( \frac{(100 [ml])}{100\%} \right) = 15 [g]$$

Para obtener la fracción molar: se obtiene la masa molar del ácido sulfúrico  $H_2SO_4$

$(H_2SO_4)$	Masas atómicas
2 átomos de H	$2 (1.008 [uma]) = 2.016 [uma]$
1 átomo de S	$32.07 [uma]$
4 átomos de O	$4 (16 [uma]) = 64.00 [uma]$
suma masas atómicas=masa molar	$98.086[uma]= 98.086 [g/mol]$





Ahora se obtendrá el número de moles del ácido sulfúrico ( $H_2SO_4$ ):

$$\text{Núm. de moles de } (H_2SO_4) = (15 [g](H_2SO_4)) \left( \frac{1 \text{ mol } (H_2SO_4)}{98.086 [g](H_2SO_4)} \right) = 0.15$$

Del volumen total de 100 [ml], el agua sería la cantidad restante de los 100 [ml] con respecto a la cantidad en volumen de ( $H_2SO_4$ )

$$\text{volumen de } H_2SO_4 = \frac{15 [g] \text{ de } H_2SO_4}{1840 [kg/m^3] \left( \frac{1000 [g]}{1 [kg]} \right) \left( \frac{1 [m]}{100 [cm]} \right)^3 \left( \frac{1 [cm]}{1 [ml]} \right)} = 8.15 [ml] \text{ de } H_2SO_4$$

$$\text{volumen de agua } (H_2O) = 100 [ml] - 8.15 [ml] = 91.85 [ml]$$

Se obtiene la masa molar del agua ( $H_2O$ )

( $H_2O$ )	Masas atómicas
2 átomos de H	2 (1.008 [uma]) = 2.016 [uma]
1 átomo de O	16 [uma]
suma masa atómica=masa molar	18.016[uma]= 18. 016[g/mol]

Una vez obtenida la masa molar, se obtendrá el número de moles del agua ( $H_2O$ )

$$\text{Núm. de moles de } (H_2O) = (91.85 [g](H_2O)) \left( \frac{1 \text{ mol } (H_2O)}{18.016 [g](H_2O)} \right) = 5.09 [\text{mol}] \text{ de } H_2O$$

$$\text{Fracción molar del componente } A = X_A = \frac{\text{moles de } A}{\text{suma de los moles de todos los componentes}}$$

$$X_{(H_2SO_4)} = \frac{\text{moles de } (H_2SO_4)}{\text{moles } (H_2O) + \text{moles } (H_2SO_4)} = \frac{0.15 \text{ moles de } (H_2SO_4)}{5.09 \text{ moles } H_2O + 0.15 \text{ moles } (H_2SO_4)}$$

$$X_{(H_2SO_4)} = 0.028$$

### PROBLEMA TIPO:

Se tienen 85 [g] de hidróxido de sodio (NaOH) en disolución acuosa cuya masa es de 750 [g]. Calcule el porcentaje masa/volumen del hidróxido de sodio. Considere que la disolución final tiene una densidad de 1.15 [g/ml].

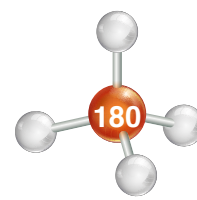
Solución:

$$\%m/v = \frac{\text{masa de soluto } [g]}{\text{volumen de la disolución } [ml]} \times 100\%$$

$$d = \frac{m}{v} = \frac{750 [g]}{v}$$

$$v = \frac{m}{d} = \frac{750 [g]}{1.15 \left[ \frac{g}{ml} \right]} = 750 [g] \left( \frac{1 [ml]}{1.15 [g]} \right) = 652.17 [ml]$$

$$\% \frac{m}{v} = \frac{85 [g] NaOH}{652.17 [ml]} \times 100\% = 13.03 \left[ \frac{g}{ml} \right]$$





## 6.8 Autoevaluación

### Cuestionario de autoevaluación del Capítulo 6

Instrucciones: Resuelve los siguientes ejercicios o selecciona la opción correcta, según corresponda.

#### Conceptos de mol y masa molar.

1. ¿Cuál es la masa de 1 mol de pirita ( $\text{FeS}_2$ )?
2. ¿Cuál es la masa en gramos de 3 moles de esfalerita ( $\text{ZnS}$ )?
3. ¿Cuántas moléculas de fluorita  $\text{CaF}_2$  hay en 250 [g]?
4. ¿Cuántos átomos de hierro están contenidos en 25 [g] de Fe?
5. En una refinería se producen 560 [kg] de metano durante un lapso de 3 horas. Se sabe que el precio del metano es de \$62.00 por mol y el costo de producción de cada mol es de \$20.00. Si se trabajan 10 horas por día, ¿Cuánto metano se producirá y cuál será la ganancia de la empresa durante 5 días hábiles de trabajo?

#### Relaciones estequiométricas: relación en entidades fundamentales, relación molar y relación en masa.

1. En la siguiente ecuación se observa la reacción que ocurre para la obtención del carburo de tungsteno ( $\text{W}_2\text{C}$ ):  
$$\text{F}_6 + \text{C}_6\text{H}_6 + 33 \text{H}_2 \longrightarrow 6\text{W}_2\text{C} + 72 \text{HF}$$

La masa que se obtiene de carburo de tungsteno, si los reactivos se agotan completamente es:

a) 3160 [g]                      b) 1310 [g]                      c) 2280 [g]                      d) 2640 [g]
2. En una planta se necesita vulcanizar el caucho utilizando óxido de zinc ( $\text{ZnO}$ ). A continuación, se indica la reacción química para producirlo.  $\text{Zn} + \text{O}_2 \rightarrow \text{ZnO}$ 

Los coeficientes que balancean la ecuación química, ordenados de izquierda a derecha, son:

a) 2, 1, 1                      b) 3, 1, 3                      c) 2,  $\frac{1}{4}$ , 2                      d) 1,  $\frac{1}{2}$ , 1
3. Al calentar el clorato de potasio,  $\text{KClO}_3$ , se obtiene oxígeno,  $\text{O}_2$ , y cloruro de potasio,  $\text{KCl}$ . ¿Cuántas moles de  $\text{KCl}$  se obtienen si se producen 9.6 [g] de  $\text{O}_2$ ?

a) 0.20                      b) 0.12                      c) 0.24                      d) 0.18
4. ¿Cuántas moléculas de dióxido de azufre,  $\text{SO}_2$ , se obtienen al quemar completamente 15 [g] de azufre,  $\text{S}$ ?  
$$\text{S} + \text{O}_2 \rightarrow \text{SO}_2$$

a)  $2.82 \times 10^{20}$                       b)  $2.82 \times 10^{23}$                       c)  $2.82 \times 10^{24}$                       d)  $2.82 \times 10^{21}$
5. ¿Cuántas moles de oxígeno,  $\text{O}_2$ , se necesitan para producir 1.50 [mol] de cloro,  $\text{Cl}_2$ ?  
$$4\text{HCl} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{Cl}_2$$

a) 1.25                      b) 1.50                      c) 3.00                      d) 0.75

#### Reacciones ácido-base y pH

1. El pH de una disolución de  $\text{KOH}$  cuya concentración es 0.850 [M] corresponde a:  
a) 9.33                      b) 13.93                      c) 8.82                      d) 11.47

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

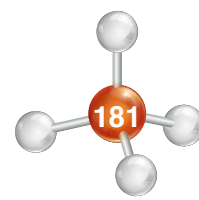
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





2. Calcule la concentración de iones  $H^+$  en una muestra de agua subterránea cuyo valor de pH es 3.5.
- a)  $1.66 \times 10^{-4}$  [M]      b)  $3.22 \times 10^{-5}$  [M]      c)  $3.52 \times 10^{-5}$  [M]      d)  $3.16 \times 10^{-4}$  [M]
3. Calcule la concentración de los iones  $OH^-$  en la muestra de agua del inciso anterior.
- a)  $3.16 \times 10^{-11}$  [M]      b)  $6.02 \times 10^{-11}$  [M]      c)  $5.28 \times 10^{-10}$  [M]      d)  $6.02 \times 10^{-10}$  [M]
4. Una disolución acuosa de ácido clorhídrico, HCl, proporciona una concentración de  $H^+$  de  $1.22 \times 10^{-4}$   $[\frac{mol}{cm^3}]$ . El valor del pH de la disolución es:
- a) 0.91      b) 3.91      c) 2.91      d) 1.91
5. Se mezclan 50 [ml] de una disolución de HCl 0.2 [M] con 60 [ml] de una disolución de NaOH 0.15 [M]. La disolución resultante tendrá un carácter:
- a) Básico      b) Neutro      c) Anfótero      d) Ácido

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

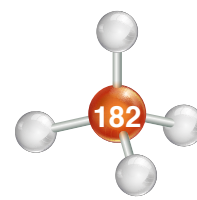
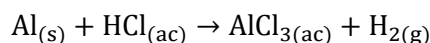
Cap. 22

### Estequiometría

1. ¿Cómo se le conoce a la parte de la química que estudia las relaciones cuantitativas entre los reactivos y los productos en una reacción química?
- a) Ecuación química      b) Relaciones ponderables  
c) Fórmula química      d) Estequiometría
2. ¿En qué año se propuso la "Ley de la conservación de la materia"?
- a) 1786      b) 1780      c) 1788      d) 1785
3. Balancee la siguiente ecuación química por el método de tanteo.  $H_2 + O_2 \rightarrow H_2O$
- a)  $2 H_2 + O_2 \rightarrow 2 H_2O$       c)  $H_2 + 2 O_2 \rightarrow 2 H_2O$   
b)  $3 H_2 + O_2 \rightarrow H_2O$       d)  $H_2 + O_2 \rightarrow 4 H_2O$
4. Encuentre los coeficientes estequiométricos de la siguiente reacción:
- $$a As_2O_3 + b HNO_3 + c H_2O \rightarrow d H_3AsO_4 + e NO_2$$
- a)  $a=1, b=6, c=1, d=3, e=4$       c)  $a=2, b=4, c=2, d=1, e=4$   
b)  $a=1, b=4, c=1, d=2, e=4$       d)  $a=4, b=2, c=1, d=1, e=1$
5. La esfalerita es un mineral de sulfuro de zinc ( $ZnS$ ) y una fuente importante del metal zinc. El primer paso del procesamiento de la mena consiste en calentar el sulfuro con oxígeno para obtener óxido de zinc y dióxido de azufre ( $SO_2$ ). ¿Cuántos [kg] de gas oxígeno se combinan con  $5 \times 10^3$  [g] de sulfuro de zinc en esta reacción?
- $$ZnS + \frac{3}{2} O_2 \rightarrow ZnO + SO_2$$
- a) 2.46      b) 2.84      c) 1.82      d) 3.28

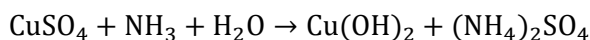
### Reactivo limitante y en exceso

1. El reactivo limitante es aquella sustancia que se consume parcialmente en una reacción química. V ( ) F ( )
2. El aluminio reacciona con una solución acuosa de HCl, se produce hidrógeno gaseoso como uno de los productos. ¿Cuántas moles de hidrógeno se desprenden al reaccionar 5.2 moles de aluminio con un exceso de HCl acuoso?



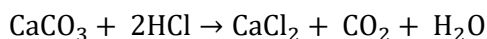


- a) 7.8 mol de H<sub>2</sub>      b) 7.4 mol de H<sub>2</sub>      c) 7.0 mol de H<sub>2</sub>      d) 7.6 mol de H<sub>2</sub>
3. El amoníaco es una base que forma hidróxidos cuando se añade a disoluciones de la mayoría de los compuestos metálicos:



Si para el proceso anterior se hacen reaccionar 200[g] de amoníaco con 200[g] de sulfato cúprico, calcule:

- 3.1) Reactivo limitante y en exceso.  
3.2) Las moles de sulfato de amonio que se generan.  
3.3) Los gramos de agua que reaccionan.
- a) No hay reactivo limitante y el R.E amoníaco, 1.789 mol, 12.566[g]  
b) RL y en exceso amoníaco, 1.546 mol, 68.908[g]  
c) R.L amoníaco y R.E sulfato cúprico, 1.235 mol, 50[g]  
d) R.L sulfato cúprico y R.E amoníaco, 1.254 mol, 45.141 [g]
4. El cianuro de hidrógeno es un gas letal que se produce por la siguiente reacción:
- $$\text{KCN}_{(ac)} + \text{HCl}_{(ac)} \rightarrow \text{KCl}_{(ac)} + \text{HCN} \uparrow$$
- Todas las demás sustancias también se encuentran en fase acuosa. Si reaccionan 290 [g] de ácido clorhídrico con 6.2 moles de cianuro de potasio, determine:
- i. Reactivo limitante y reactivo en exceso.  
ii. Las moles de cloruro de potasio que se forman.
- a) R.L cianuro de potasio; R.E ácido clorhídrico; 6.2 mol  
b) R.L ácido clorhídrico; R.E cianuro de potasio; 6.4 mol  
c) Los reactivos se consumen totalmente; 8.0 mol  
d) Los reactivos se consumen totalmente; 7.5 mol
5. Una caliza con un 62 [%] de pureza en CaCO<sub>3</sub> se trata con un exceso de HCl y se producen CaCl<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O. Calcule la cantidad de caliza necesaria para obtener 100 [l] de CO<sub>2</sub> medidos a 2 [atm] y 25 [°C]



- a) 8224.12 [g]      b) 1319.44 [g]      c) 1423.18 [g]      d) 8180.16 [g]

### Rendimiento porcentual (Teórico y experimental)

1. ¿Cuál es la fórmula para el rendimiento porcentual?

a)  $\% \text{rendimiento} = \frac{\text{rendimiento teórico}}{\text{rendimiento experimental}} \times 100$

b)  $\% \text{rendimiento} = \frac{\text{rendimiento experimental}}{\text{rendimiento teórico}} \times 100$

c)  $\% \text{rendimiento} = \frac{(\text{rendimiento teórico})(\text{rendimiento experimental})}{100}$

d)  $\% \text{rendimiento} = \frac{(\text{rendimiento teórico})}{\text{rendimiento experimental}} \times 100$

2. El rendimiento teórico es mayor que el rendimiento experimental. V ( ) F ( )

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

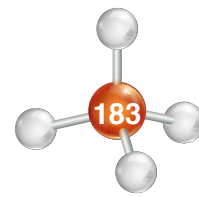
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

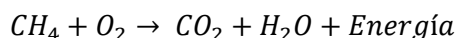
Cap. 22



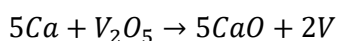




3. El gas natural, cuya composición es casi completamente metano, se utiliza como combustible en algunas chimeneas, cuyo funcionamiento permite que dicha combustión se realice con un 83% de eficiencia. Suponiendo que en determinada operación se produjeron 150 toneladas de  $\text{CO}_2$ , calcule lo siguiente:



- Las toneladas de metano utilizadas.
  - Las toneladas de agua producidas.
- a) 65.716[ton]; 300[ton]                      b) 103.234[ton]; 818 [ton]  
c) 54.545[ton]; 300[ton]                      d) 180.72[ton]; 300[ton].
4. El vanadio se obtiene industrialmente con base en la siguiente reacción:



En un proceso, reaccionan  $3.08 \times 10^3$  [g] de  $\text{V}_2\text{O}_5$  con  $3.92 \times 10^3$  [g] de Ca. Calcule:

- el rendimiento teórico de vanadio en gramos
  - el porcentaje de rendimiento si se obtienen 1606[g] del mismo
- a) 1725.84[g]; 93.06%                      b) 345[g]; 98%  
b) 2345.09[g]; 100%                      d) 1765.84[g]; 92.33%
5. Se prepara óxido de aluminio al calentar 450[g] de óxido de cromo (II) con 250[g] de aluminio. Si se obtiene 200[g] de óxido de aluminio, calcule el porcentaje de rendimiento.

La reacción del proceso es:  $\text{Al} + \text{CrO} \xrightarrow{\Delta} \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Cr}$

- a) 100%                      b) 98%                      c) 95.6%                      d) 92.33%

### La fase gaseosa y la ecuación del gas ideal.

- El término gas hace referencia a:
  - Un estado de la materia donde hay un movimiento caótico de moléculas y/o átomos
  - Un estado de la materia donde hay un movimiento ordenado de moléculas y/o átomos
  - Un estado de la materia donde no existe compresión de moléculas y/o átomos
  - Un estado de la materia donde no existe energía cinética de las moléculas y/o átomos
- Hablar del volumen de un gas es equivalente a hablar del volumen del recipiente donde se aloja.  $V( ) F( )$
- Consideraciones para establecer que un gas es ideal:
  - Volumen del gas despreciable o considerable comparado con el volumen del recipiente, colisiones elásticas y bajas presiones
  - Volumen del gas considerable o considerable comparado con el volumen del recipiente, colisiones elásticas y bajas presiones
  - Volumen del gas despreciable o considerable comparado con el volumen del recipiente, colisiones elásticas y altas presiones

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

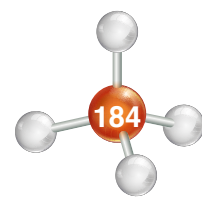
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





- d) Volumen del gas considerable o considerable comparado con el volumen del recipiente, así como altas presiones
4. Principales leyes del gas ideal:
- a) Ley de Boyle, Ley de Avogadro, Ley de la gravitación universal
  - b) Ley de Boyle, Ley de Avogadro, Ley de Charles
  - c) Ley de Charles y Ley de Avogadro
  - d) Ley de Boyle y Ley de Charles
5. Ley que establece que el volumen de un gas a presión constante aumenta linealmente con la temperatura.
- a) Ley de Avogadro
  - b) Ley de Charles
  - c) Ley de Boyle
  - d) Ley de Joule
6. ¿Qué volumen ocuparán 15 [g] de Argón a 200 [°F] y 735 [mm] de Hg?
- a) 11.66 [L]
  - b) 11.123[L]
  - c) 12.0 [L]
  - d) 10.9 [L]
7. Un globo de caucho elástico contiene cierta cantidad de un gas caliente a la presión de 1[atm]. El volumen inicial es de  $2.64 \times 10^6$ [L]. Cuando el globo cayó al mar, adquirió la temperatura de 15[°C], si el volumen del gas a presión constante disminuyó hasta  $2.04 \times 10^6$ [L]¿Cuál era la temperatura inicial del gas en [°C]?
- a) 100[°C]
  - b) 99[°C]
  - c) 99.707[°C]
  - d) 99.705[°C]
8. Un tanque de acero contiene nitrógeno, N<sub>2</sub>, a 25 [°C] y 10 [atm], determine la presión del gas cuando el tanque se calienta a 150 [°C].
- a) 10 [atm]
  - b) 14.19 [atm]
  - c) 13.18 [atm]
  - d) 12.19 [atm]
9. La densidad de un gas ideal ( $R = 287 \frac{J}{kg K}$ ) que se encuentra a 30 [°C] y 780 [mm Hg] es:
- a)  $2.21 \left[ \frac{kg}{m^3} \right]$
  - b)  $0.92 \left[ \frac{kg}{m^3} \right]$
  - c)  $1.84 \left[ \frac{kg}{m^3} \right]$
  - d)  $1.19 \left[ \frac{kg}{m^3} \right]$
10. Un gas ideal tiene una densidad de  $1.28 \left[ \frac{mg}{ml} \right]$  a 18 [°C] y 0.98 [atm], ¿cuál es la masa molar del gas?
- a)  $31.21 \left[ \frac{g}{mol} \right]$
  - b)  $28.15 \left[ \frac{g}{mol} \right]$
  - c)  $36.18 \left[ \frac{g}{mol} \right]$
  - d)  $29.70 \left[ \frac{g}{mol} \right]$

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

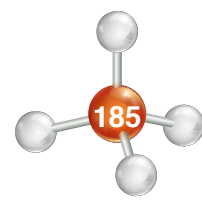
Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

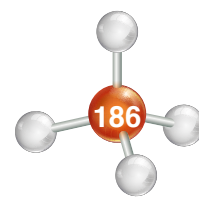
**Unidades de concentración: molaridad, porcentajes masa/masa, masa/volumen y volumen/volumen, fracción molar y partes por millón.**

1. Se tiene una disolución de 900 [ml] que contiene cloruro de potasio (KCl) disuelta en agua (H<sub>2</sub>O), en la cual el porcentaje masa/volumen es del 25%. Calcule la cantidad de gramos de cloruro de potasio (solute) que tendrá esta disolución.
- a) 175 [g]
  - b) 225 [g]
  - c) 125 [g]
  - d) 275 [g]





2. Como se sabe, el gas natural está compuesto de una mezcla de hidrocarburos, principalmente el metano, en menor medida encontramos el etano y el propano. Se desea saber la fracción molar del metano si en una mezcla tenemos 11.31 moles de metano ( $\text{CH}_4$ ), 0.741 moles de etano ( $\text{C}_2\text{H}_6$ ) y 0.281 moles de propano ( $\text{C}_3\text{H}_8$ ).
- a) 0.882                      b) 0.917                      c) 0.060                      d) 0.023
3. Una fuente de contaminación que se presenta en el agua subterránea es causada por el ion nitrato ( $\text{NO}_3^-$ ) que se mezcla con las aguas de los acuíferos. Una de las razones por las que se origina es el uso en la agricultura de fertilizantes nitrogenados. Se ha tomado una muestra de agua de un acuífero superficial del cual se extrae agua para consumo humano. Calcule la cantidad en ppm de ion nitrato que contiene una disolución, si se encuentran disueltos 0.150 g de ion nitrato en  $1300 \text{ cm}^3$  de dicha disolución.
- a) 162.15                      b) 195.20                      c) 130.00                      d) 115.38
4. Si se sabe que un barril seleccionado de hidrocarburo contiene 42 [galones estadounidenses] y tiene disueltos 5 [mol] de componentes ligeros. Calcule la molaridad de los componentes ligeros.
- a)  $0.0315 \left[ \frac{\text{mol}}{\text{L}} \right]$                       b)  $0.0283 \left[ \frac{\text{mol}}{\text{L}} \right]$                       c)  $0.0382 \left[ \frac{\text{mol}}{\text{L}} \right]$                       d)  $0.0352 \left[ \frac{\text{mol}}{\text{L}} \right]$
5. Una disolución de ácido sulfúrico,  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , contiene 820 [g] de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  por litro de disolución. Si la densidad de la disolución es  $1.24 \left[ \frac{\text{g}}{\text{L}} \right]$ , determine la molaridad y molalidad del ácido sulfúrico en la disolución.
- a)  $7.62 \left[ \frac{\text{mol}}{\text{L}} \right]$ ;  $16.48 \left[ \frac{\text{mol}}{\text{kg}} \right]$                       b)  $6.48 \left[ \frac{\text{mol}}{\text{L}} \right]$ ;  $15.54 \left[ \frac{\text{mol}}{\text{kg}} \right]$   
c)  $8.37 \left[ \frac{\text{mol}}{\text{L}} \right]$ ;  $19.92 \left[ \frac{\text{mol}}{\text{kg}} \right]$                       d)  $9.25 \left[ \frac{\text{mol}}{\text{L}} \right]$ ;  $18.26 \left[ \frac{\text{mol}}{\text{kg}} \right]$





# Capítulo 7

## Termoquímica y Equilibrio Químico

Antonia del Carmen Pérez León, Hermelinda Concepción Sánchez Tlaxqueño,  
Francisco Laguardia Reyes

### 7.1 Introducción

Generalmente la energía es definida como la capacidad para generar un cambio en un sistema. La definición más aceptada por la química para el trabajo es el cambio de energía que resulta de un proceso. La energía tiene diferentes formas de presentación o manifestación. Las de mayor importancia para la química son:

-La **energía cinética** es la energía asociada a un objeto en movimiento.

-La **energía potencial**, energía disponible en función de la posición de un objeto.

Empero, se reconocen otras formas: eléctrica, electromagnética, nuclear y química. En un nivel atómico o molecular, estas formas pueden ser agrupadas en las citadas energía cinética o potencial.

### 7.2 Calor y entalpía de una reacción química. Determinación de la entalpía de una reacción

#### 7.2.1 Calor

Casi todas las reacciones químicas absorben o producen energía, por lo general en forma de calor. En este nivel de la explicación, es de vital importancia diferenciar entre *energía térmica* y *calor*. El *calor* es la transferencia de energía térmica entre dos cuerpos que están a diferentes temperaturas. A pesar de que el término calor por sí mismo implica transferencia de energía, generalmente se habla de "*calor absorbido o liberado*" para describir los cambios de energía que ocurren durante un proceso. La termoquímica se encarga del estudio del intercambio de calor en las reacciones químicas.

Un *sistema* es una región del espacio que se selecciona para llevar a cabo un análisis determinado. Los sistemas se pueden clasificar de la siguiente forma (Figura 7.1):

- Sistema abierto:** Puede intercambiar masa y energía, generalmente en forma de calor, con sus alrededores.
- Sistema cerrado:** Permite la transferencia de energía, pero no de masa con los alrededores.
- Sistema aislado:** Impide la transferencia de masa o energía con los alrededores.

#### Sumario

##### 7.1 Introducción

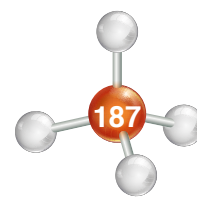
##### 7.2 Calor y entalpía de una reacción química. Determinación de la entalpía de reacción

##### 7.3 Método indirecto o ley de Hess

##### 7.4 Constante de equilibrio de una reacción química

##### 7.5 Principio de Le Châtelier

##### 7.6 Autoevaluación



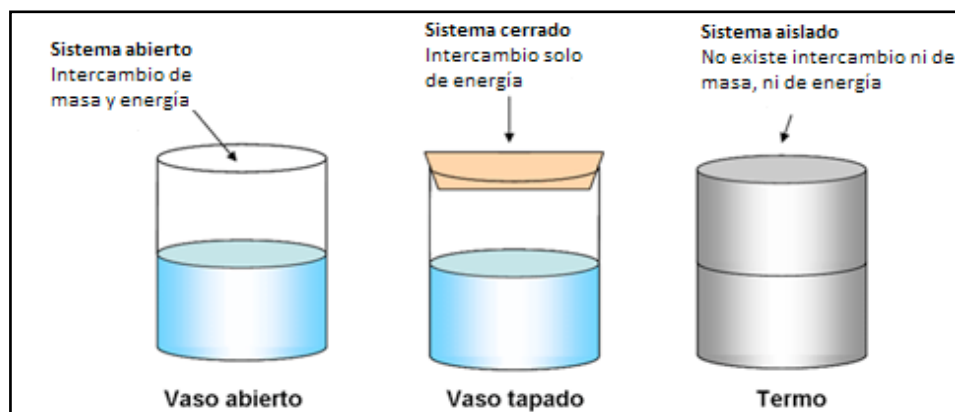


Figura 7.1. Representación de los diferentes tipos de sistemas.

### 7.2.2 Entalpía

La mayoría de los cambios físicos y químicos ocurren en condiciones de presión constante (presión atmosférica). Para medir el calor absorbido o liberado por un sistema durante un proceso a presión constante, se utiliza la propiedad conocida como *entalpía*, representada por el símbolo  $H$ . La entalpía es una propiedad extensiva; ya que depende de la cantidad de materia. En termoquímica importa cuantificar el cambio de entalpía,  $\Delta H$ , que ocurre en un proceso determinado. Este cambio de entalpía, también conocido como *entalpía de reacción*, es la diferencia entre las entalpías de los productos y las entalpías de los reactivos.

$$\Delta H = H_{\text{productos}} - H_{\text{reactivos}}$$

La entalpía de una reacción puede ser positiva o negativa, lo cual depende del tipo de proceso que se lleva a cabo. Para un proceso endotérmico (el sistema absorbe calor de los alrededores),  $\Delta H$  es positivo ( $\Delta H > 0$ ). Para un proceso exotérmico (el sistema libera calor hacia los alrededores),  $\Delta H$  es negativo ( $\Delta H < 0$ ).

### 7.2.3 Calorimetría

Para determinar los cambios de entalpía en una reacción química se utiliza una técnica experimental llamada *calorimetría*. Esta técnica se basa en la observación de los cambios de temperatura que sufre un sistema al absorber o liberar calor y se realiza en un dispositivo llamado calorímetro (Figura 7.2), en el cual se mide el cambio de temperatura de una cantidad conocida de sustancia de capacidad térmica específica conocida.

En un proceso exotérmico el calor se invierte en dos partes:

$$\left( \begin{array}{l} \text{cantidad de calor} \\ \text{desprendida en la reacción} \end{array} \right) = \left( \begin{array}{l} \text{cantidad de calor absorbida} \\ \text{por el calorímetro} \end{array} \right) + \left( \begin{array}{l} \text{cantidad de calor absorbida} \\ \text{por la disolución} \end{array} \right)$$

Este proceso puede ser comprendido de mejor manera si son claros los conceptos de *capacidad térmica específica* y *capacidad calorífica*.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

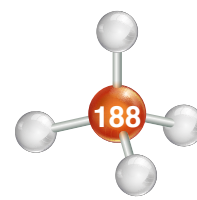
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





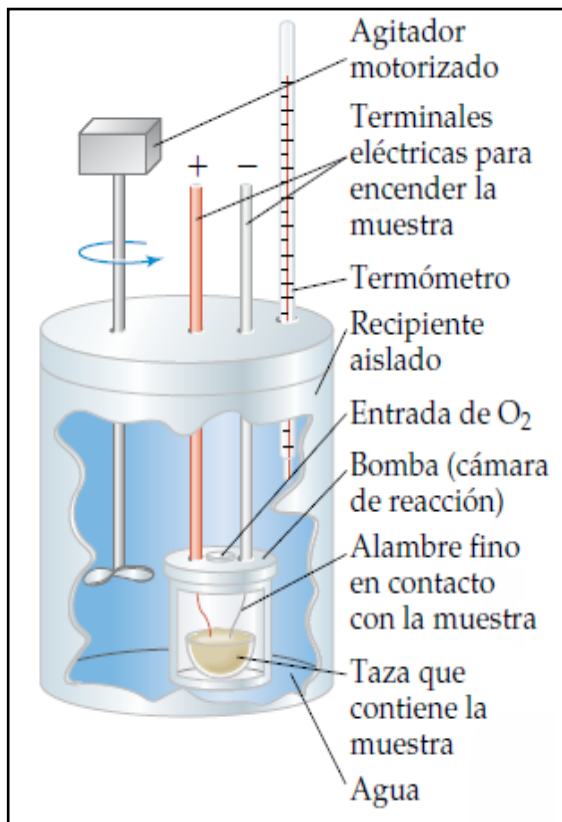


Figura 7.2. Calorímetro.

La **capacidad térmica específica (c)** de una sustancia es la cantidad de calor necesaria para elevar en un grado (Celsius o Kelvin) la temperatura de un gramo de dicha sustancia. Esta propiedad es intensiva.

La **capacidad calorífica (C)** de una sustancia es la cantidad de calor necesaria para elevar en un grado (Celsius o Kelvin) la temperatura de una determinada cantidad de dicha sustancia, ésta es una propiedad extensiva. La relación entre ambas es:

$$C = mc$$

Si se conoce la capacidad térmica específica y la masa de una sustancia, la variación de la temperatura que sufre dicha sustancia es directamente proporcional al calor absorbido o liberado en el proceso:

$$Q = mc\Delta T$$

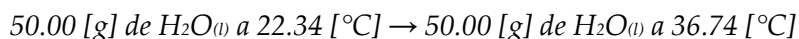
$$q = c\Delta T$$

El signo de  $q$  se considera positivo para procesos endotérmicos y negativo para procesos exotérmicos.

**PROBLEMA TIPO:**

A 50.00 [g] de agua contenidos en un calorímetro se les suministran 3.358 [kJ] de calor. La temperatura del agua y el calorímetro, originalmente a 22.34 [°C], aumentan a 36.74 [°C]. Calcule la capacidad calorífica del calorímetro en [J/°C]. La capacidad térmica específica del agua es de 4.184 [J/g•°C].

*Solución: Primero se calcula la cantidad de calor que absorbe el agua del calorímetro, el resto de calor se lo absorbe el calorímetro, de manera que, con este valor, puede determinarse la capacidad calorífica del calorímetro.*



El cambio de temperatura es de  $(36.74 - 22.34) \text{ [}^\circ\text{C]} = 14.40 \text{ [}^\circ\text{C]}$

$$Q_{\text{agua [J]}} = 50.00 \text{ [g]} \times \frac{4.184 \text{ [J]}}{\text{[g} \cdot \text{ }^\circ\text{C]}} \times 14.40 \text{ [}^\circ\text{C]} = 3.012 \times 10^3 \text{ [J]}$$

La cantidad total de calor que se suministró fue de 3.358 [kJ] o  $3.358 \times 10^3 \text{ [J]}$ . La diferencia entre estos valores de calor es la cantidad que absorbió el calorímetro.

$$Q_{\text{cal [J]}} = 3.358 \times 10^3 \text{ [J]} - 3.012 \times 10^3 \text{ [J]} = 346 \text{ [J]}$$

Para obtener la capacidad calorífica del calorímetro, se divide la cantidad de calor que absorbió el calorímetro, 346 [J], entre su cambio de temperatura.

$$C \left[ \frac{\text{J}}{^\circ\text{C}} \right] = \frac{346 \text{ [J]}}{14.40 \text{ [}^\circ\text{C]}} = 24 \left[ \frac{\text{J}}{^\circ\text{C}} \right]$$

El calorímetro absorbe 24 [J] de calor al incrementarse un grado Celsius su temperatura.



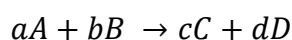
## 7.2.4 Entalpía estándar de formación y de reacción

La **entalpía estándar de formación** ( $\Delta H_f^0$ ) es el calor liberado o absorbido en el proceso de formación de una mol de una sustancia a partir de sus elementos a una presión de 1 [atm] y a una temperatura de 25 [°C]. Se considera que los elementos están en su estado estándar a 1 [atm] y 25 [°C], de aquí el término “entalpía estándar”. Donde “0” representa las condiciones del estado estándar, y “f”, significa formación. La entalpía de formación de cualquier elemento en su forma más estable es igual a cero. También suele recibir el nombre de calor estándar de formación o, simplemente, calor de formación.

La **entalpía estándar de reacción** ( $\Delta H_r^0$ ) se define como la cantidad de calor que se desprende o se absorbe durante una reacción química a las condiciones de 1 [atm] y 25 [°C].

## 7.2.5 Determinación de la entalpía estándar de una reacción

Consideremos la siguiente reacción hipotética:



Donde a, b, c y d son los coeficientes estequiométricos. La entalpía de reacción,  $\Delta H_r^0$ , está dada por

$$\Delta H_r^0 = [c\Delta H_f^0(C) + d\Delta H_f^0(D)] - [a\Delta H_f^0(A) + b\Delta H_f^0(B)]$$

Donde a, b, c y d están en moles. Se puede generalizar la ecuación anterior como sigue

$$\Delta H_r^0 = \sum n\Delta H_f^0(\text{productos}) - \sum m\Delta H_f^0(\text{reactivos})$$

Donde m y n representan los coeficientes estequiométricos (en mol) de reactivos y productos, respectivamente.

Si se desea calcular  $\Delta H_r^0$ , primero se deben de conocer los valores de  $\Delta H_f^0$  de los compuestos en la reacción. Para ello, se puede utilizar el método indirecto, también conocido como ley de Hess.

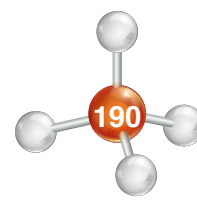
## 7.3 Método indirecto o ley de Hess

Muchos compuestos no se pueden sintetizar directamente a partir de sus elementos. En algunos casos la reacción se realiza con demasiada lentitud o suceden reacciones secundarias que producen otras sustancias además del compuesto de interés. En estos casos los valores de  $\Delta H$  de reacción se determinan por un procedimiento indirecto que se basa en la Ley de Hess.

Para determinar  $\Delta H_r^0$ , en casos donde las reacciones ocurren con demasiada lentitud o suceden reacciones secundarias que producen otras sustancias, además del compuesto que se busca, se emplea un procedimiento indirecto que se basa en la **ley de la sumatoria de los calores** o **ley de Hess**.

La **ley de Hess** establece: “Si una serie de reactivos (por ej. A y B) reaccionan para dar una serie de productos (por ej. C y D), la cantidad de calor involucrado (liberado o absorbido), es siempre la misma, independientemente de si la reacción se lleva a cabo en una, dos o más etapas; siempre y cuando, las condiciones de presión y temperatura de las diferentes etapas sean las mismas”.

La regla general para aplicar la ley de Hess implica que se debe acomodar la serie de reacciones químicas (correspondientes a la serie de etapas) de tal manera que, cuando se sumen, se cancelen



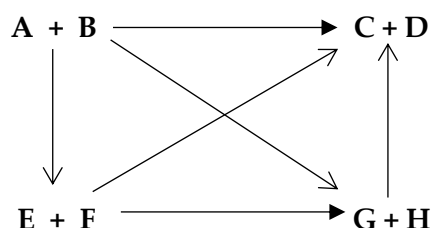


todas las especies, excepto los reactivos y productos que aparecen en la reacción de interés. Esto significa que deben quedar los elementos del lado izquierdo y el compuesto de interés del lado derecho de la flecha. Para lograr esto, se debe multiplicar alguna o todas las ecuaciones que representan las etapas individuales, por los coeficientes apropiados. El cambio de entalpía de la reacción se expresa, entonces, como:

$$\Delta H_{reacción}^0 = \Delta H_a^0 + \Delta H_b^0 + \Delta H_c^0 + \dots + \Delta H_n^0$$

Donde, a, b, c, ... se refieren a las ecuaciones termoquímicas (ecuación química balanceada, junto con su valor de  $\Delta H$ ) que pueden sumarse para obtener la ecuación de la reacción deseada.

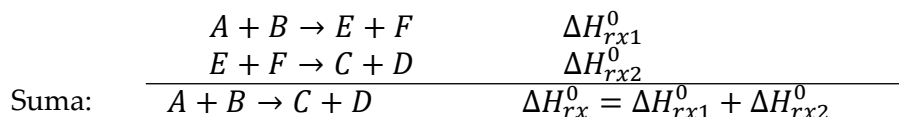
Una forma sencilla de comprender este planteamiento consiste en el empleo del sistema siguiente:



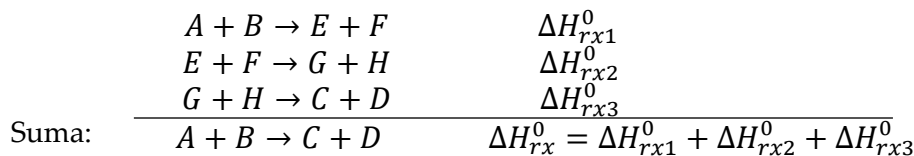
Así, no importa si el proceso que inicia con los reactivos A y B para generar los productos C y D, se realiza en una etapa:



En dos etapas:



En tres etapas:

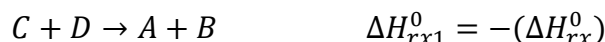


Como se observa, la cantidad de calor involucrada en el proceso total siempre es la misma ( $\Delta H_{rx}^0$ ). Para determinar la  $\Delta H_{rx}^0$  de una reacción particular se deben combinar las reacciones dadas (sumarlas, invertirlas o multiplicarlas por un factor), para obtener la reacción deseada. Recuerde que si invierte una reacción, entonces el signo de su  $\Delta H_{rx}^0$  se cambia. Además, si una reacción se multiplica por un escalar, el valor de  $\Delta H_{rx}^0$  también se debe multiplicar por el mismo escalar, como se muestra en los ejemplos siguientes:

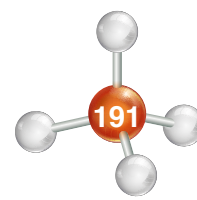
Si se tiene la reacción:



Al invertirla, quedaría:



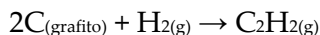
Y al multiplicarla por un escalar x:





**PROBLEMA TIPO:**

Calcule la entalpía estándar de formación del acetileno (C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>) a partir de sus elementos:

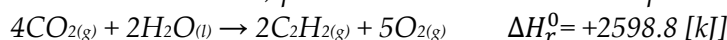


Las ecuaciones para cada etapa y los cambios de entalpía correspondientes son:

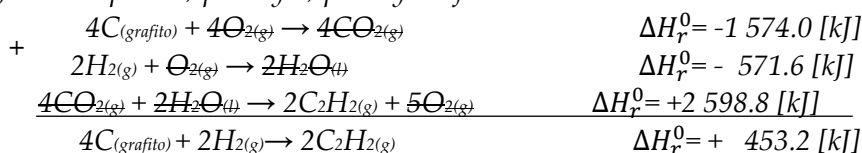
- a)  $C_{(grafito)} + O_{2(g)} \rightarrow CO_{2(g)} \quad \Delta H_r^0 = -393.5 \text{ [kJ]}$
- b)  $H_{2(g)} + \frac{1}{2} O_{2(g)} \rightarrow H_2O_{(l)} \quad \Delta H_r^0 = -285.8 \text{ [kJ]}$
- c)  $2C_2H_{2(g)} + 5O_{2(g)} \rightarrow 4CO_{2(g)} + 2H_2O_{(l)} \quad \Delta H_r^0 = -2598.8 \text{ [kJ]}$

Solución:

Debido a que se quiere obtener una ecuación con los elementos C y H<sub>2</sub> como reactivos y C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> como producto, lo que representa la síntesis de acetileno a partir de sus elementos, es necesario eliminar O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O de las ecuaciones a), b) y c). Se observa que c) contiene cinco moles de O<sub>2</sub>, cuatro moles de CO<sub>2</sub> y dos moles de H<sub>2</sub>O. Primero se invierte c) para tener C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> del lado de los productos:

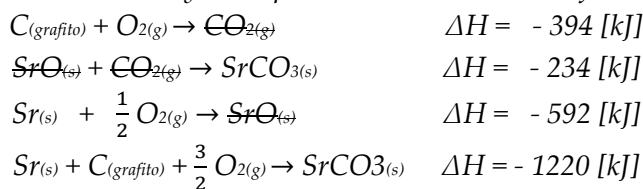


A continuación, se multiplica a) por 4 y b) por 2 y se efectúa la suma de las ecuaciones modificadas



Debido a que la ecuación anterior representa la síntesis de una mol de C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> a partir de sus elementos, se tiene que  $\Delta H_f^0(C_2H_2) = \Delta H_r^0/mol = +226.6 \text{ [kJ/mol]}$ .

Paso 2. Colocar las reacciones de acuerdo con el paso 1 y realizar la suma de ellas, cancelando compuestos idénticos que se encuentren como reactivos y como productos en reacciones diferentes.

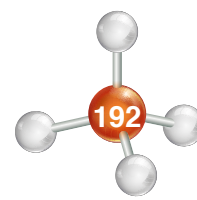


**7.3.1 Calor de disolución y de dilución**

También hay cambios de entalpía cuando un soluto se dispersa en un disolvente o cuando se diluye una disolución.

**Calor de disolución:** La disolución de un soluto en un disolvente produce cambios de calor que pueden medirse. El calor de disolución o entalpía de disolución,  $\Delta H_{disolución}$ , es el calor generado o absorbido cuando cierta cantidad de soluto se diluye en cierta cantidad de disolvente. La cantidad  $\Delta H_{disolución}$  representa la diferencia entre la entalpía de la disolución final y la entalpía de los componentes originales antes de mezclarse.

No es posible medir  $H_{disolución}$ , pero en un calorímetro a presión constante se puede determinar su diferencia,  $\Delta H_{disolución}$ . Al igual que otros cambios de entalpía,  $\Delta H_{disolución}$  es positivo para procesos endotérmicos y negativo para procesos exotérmicos.





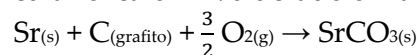
**Calor de dilución:** Cuando se diluye una disolución preparada previamente; es decir, cuando se le adiciona más disolvente para disminuir la concentración total del soluto, es común que se libere o absorba calor adicional. El calor de dilución es el cambio de calor asociado al proceso de dilución. Si cierto proceso de disolución es endotérmico y dicha disolución se diluye posteriormente, la misma disolución absorbe más calor de los alrededores. Lo contrario ocurre para un proceso exotérmico de disolución: se libera más calor si se añade más disolvente para diluir la disolución.

**PROBLEMA TIPO:**

A partir de las entalpías de reacción siguientes:

- a)  $4\text{CO}_{2(g)} \rightarrow 4\text{C}_{(\text{grafito})} + 4\text{O}_{2(g)} \quad \Delta H = + 1\,576 \text{ [kJ]}$
- b)  $3\text{SrCO}_{3(s)} \rightarrow 3\text{SrO}_{(s)} + 3\text{CO}_{2(g)} \quad \Delta H = + 702 \text{ [kJ]}$
- c)  $2\text{SrO}_{(s)} \rightarrow 2\text{Sr}_{(s)} + \text{O}_{2(g)} \quad \Delta H = + 1\,184 \text{ [kJ]}$

Aplique la ley de Hess para calcular el calor involucrado en la siguiente reacción:



*Solución:*

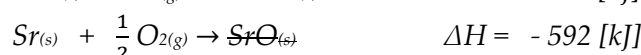
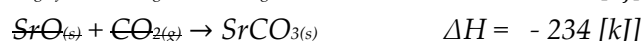
Las reacciones a, b y c, como están escritas, no pueden sumarse para obtener la ecuación requerida.

*Paso 1. Identificar en las reacciones anteriores dónde se encuentran los reactivos y productos y verificar la cantidad de moles de cada uno para indicar si la reacción se invierte, se multiplica, divide o se deja tal cual aparece.*

*En la ecuación a) hay cuatro moles de C<sub>(grafito)</sub> en el lado de los productos, pero sólo se requiere un mol en el lado de los reactivos. En la ecuación b) hay tres moles de SrCO<sub>3(s)</sub> como reactivo, pero sólo se requiere un mol como producto. La ecuación c) tiene dos moles de Sr<sub>(s)</sub> como producto, pero sólo se requiere de un mol como reactivo en la ecuación deseada. Por lo tanto, los pasos a seguir son:*

- i. *Invertir a y multiplicar por 1/4*
- ii. *Invertir b y multiplicar por 1/3*
- iii. *Invertir c y multiplicar por 1/2*

*Paso 2. Colocar las reacciones de acuerdo con el paso 1 y realizar la suma de ellas, cancelando compuestos idénticos que se encuentren como reactivos y como productos en reacciones diferentes.*

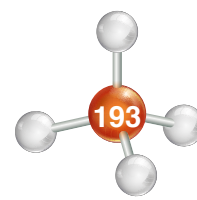


## 7.4 Constante de equilibrio de una reacción química

### 7.4.1 Equilibrio químico

El equilibrio es un estado en el que no se observan cambios en un sistema a medida que transcurre el tiempo. Cuando una reacción química llega al estado de equilibrio, las concentraciones de reactivos y productos permanecen constantes en el tiempo, sin que se produzcan cambios visibles en el sistema.

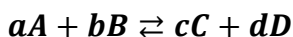
Las reacciones químicas que pueden ocurrir en cualquier dirección reciben el nombre de *reacciones reversibles*.







Estas reacciones pueden ser representadas como sigue: las letras mayúsculas representan las fórmulas de los compuestos y las minúsculas los coeficientes estequiométricos de la ecuación balanceada,



La flecha doble indica que la reacción es reversible, es decir, que tanto la reacción directa como la reacción inversa ocurren de manera simultánea. Cuando A y B reaccionan para formar C y D con la misma rapidez con la que C y D reaccionan para formar A y B, el sistema se encuentra en equilibrio.

Entonces, hay equilibrio químico cuando dos reacciones opuestas ocurren de manera simultánea a la misma velocidad.

Los equilibrios químicos son dinámicos; es decir, las moléculas individuales reaccionan en forma continua, aunque no cambie la composición global de la mezcla de reacción. En un sistema de este tipo, el equilibrio se desplazará hacia la derecha si aumenta la concentración de C, de D o de ambos (favorable a la formación de productos) y estará desplazado hacia la izquierda si más de A y B está presente (favorable a la formación de reactivos). (Figura 7.3).

El equilibrio entre dos fases de la misma sustancia se denomina *equilibrio físico* porque los cambios que suceden son procesos físicos, por ejemplo, la evaporación y condensación de agua en un recipiente cerrado a una temperatura dada.

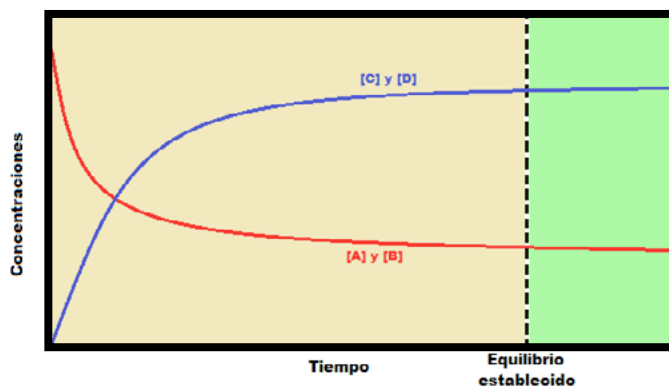
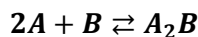


Figura 7.3. Variación de la concentración de las especies en el sistema  $A + B \rightleftharpoons C + D$  conforme se alcanza el equilibrio. En esta reacción, la formación de productos se favorece.

### 7.4.2 Constante de equilibrio

Supongamos que ocurre la siguiente reacción reversible en fase gaseosa:



La velocidad de la reacción directa es:

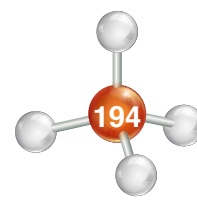
$$velocidad_d = k_d[A]^2[B]$$

La velocidad de la reacción inversa es:

$$velocidad_i = k_i[A_2B]$$

En estas expresiones,  $k_d$  y  $k_i$ , son las constantes de velocidad específicas de las reacciones directa e inversa, respectivamente. Por definición, las dos velocidades son iguales en el equilibrio ( $velocidad_d = velocidad_i$ ). Por lo tanto, puede escribirse:

$$\frac{k_d}{k_i} = \frac{[A_2B]}{[A]^2[B]}$$

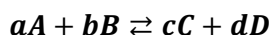




A una temperatura específica, tanto  $k_d$  como  $k_i$  son constantes, de modo que  $k_d/k_i$ , también es una constante. Esta relación recibe el nombre de *constante de equilibrio* y se representa con el símbolo  $K_c$ :

$$K_c = \frac{[A_2B]}{[A]^2[B]}$$

Este proceso puede generalizarse con la siguiente reacción reversible:



Para la reacción a una temperatura dada:

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

La ecuación anterior es la expresión de la *ley de acción de masas*, la cual establece que para una reacción reversible en equilibrio y a una temperatura constante, la relación de concentraciones de reactivos y productos tiene un valor constante  $K_c$ .

La magnitud de la constante de equilibrio indica si una reacción en equilibrio es favorable a los productos o a los reactivos. Si  $K_c$  es mucho mayor que uno, el equilibrio se desplazará hacia la derecha y favorecerá a los productos. Por el contrario, si  $K_c$  es mucho menor que uno, el equilibrio se desplazará a la izquierda y favorecerá a los reactivos.

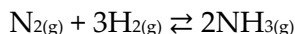
Se puede así definir a la *constante de equilibrio* como el producto de la concentración al equilibrio de los productos, dividido entre el producto de la concentración al equilibrio de los reactivos.

En cualquier ecuación química balanceada, el valor de  $K_c$ :

1. Es constante a una temperatura dada.
2. Cambia si la temperatura cambia.
3. No depende de las concentraciones iniciales.

#### PROBLEMA TIPO PARA EL CÁLCULO DE $K_c$ :

En un recipiente vacío de 5 [L], se coloca cierta cantidad de hidrógeno ( $H_{2(g)}$ ) y nitrógeno ( $N_{2(g)}$ ) a 500 [°C]. Cuando se estableció el equilibrio, estaban presentes 3.01 [mol] de  $N_{2(g)}$ , 2.10 [mol] de  $H_{2(g)}$  y 0.565 [mol] de  $NH_{3(g)}$ . Evalúe  $K_c$  de la reacción siguiente a 500 [°C].



Las concentraciones al equilibrio se obtienen dividiendo las moles de cada reactivo y producto entre el volumen, 5 [L], para después sustituir estas concentraciones en la expresión de la constante de equilibrio.

Las concentraciones al equilibrio son:

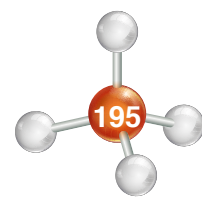
$$[N_2] = 3.01 \text{ [mol]} / 5 \text{ [L]} = 0.602 \text{ [M]}$$

$$[H_2] = 2.10 \text{ [mol]} / 5 \text{ [L]} = 0.420 \text{ [M]}$$

$$[NH_3] = 0.565 \text{ [mol]} / 5 \text{ [L]} = 0.113 \text{ [M]}$$

Solución:

$$K_c = \frac{[NH_3]^2}{[N_2][H_2]^3} = \frac{(0.113)^2}{(0.602)(0.420)^3} = 0.286$$





### 7.4.3 Variación de $K_c$ con la forma de la ecuación balanceada

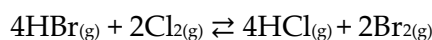
Si multiplicamos la ecuación de una reacción por un factor  $n$ , el valor original de  $K_C$  deberá ser elevado a la  $n$ ésima potencia.

#### PROBLEMA TIPO:

Se tiene la ecuación química siguiente y su constante de equilibrio a una temperatura dada.



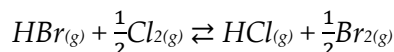
Escriba la expresión para la constante de equilibrio y calcule su valor numérico para cada una de las ecuaciones de equilibrio siguientes a la misma temperatura:



Solución a):

La ecuación original fue multiplicada por dos, de modo que  $K_C$  debe elevarse al cuadrado.

$$K_C = \frac{[\text{HCl}]^4 [\text{Br}_2]^2}{[\text{HBr}]^4 [\text{Cl}_2]^2} \quad K'_C = (K_C)^2 = (4.0 \times 10^4)^2 = 1.6 \times 10^9$$



Solución b):

La ecuación original fue multiplicada por  $\frac{1}{2}$ , de modo que  $K_C$  debe elevarse a la  $\frac{1}{2}$ .

$$K_C = \frac{[\text{HCl}][\text{Br}_2]^{1/2}}{[\text{HBr}][\text{Cl}_2]^{1/2}} \quad K'_C = \sqrt{K_C} = \sqrt{4.0 \times 10^4} = 2.0 \times 10^2$$

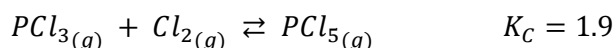
### 7.4.4 Usos de la constante de equilibrio, $K_C$

Una vez obtenido el valor de  $K_C$ , es posible realizar el proceso inverso, es decir, obtener concentraciones al equilibrio a partir de la constante de equilibrio

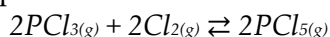
#### PROBLEMA TIPO:

A cierta temperatura, en un recipiente de 1 [L], hay una mezcla en equilibrio que contiene 0.25 [mol] de  $\text{PCl}_{5(g)}$  y 0.16 [mol] de  $\text{PCl}_{3(g)}$ .

- a) ¿Qué concentración al equilibrio de  $\text{Cl}_2$  debe estar presente, si la reacción que ocurre es la siguiente?



- b) Suponga que la ecuación química se ha escrito como:

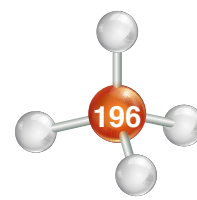


Utilice las concentraciones iniciales del inciso a) y calcule la concentración al equilibrio de  $\text{Cl}_2$ .

Solución:

- a) Dado que el volumen del recipiente es de 1 [L], la concentración molar [mol/L] de cada sustancia es numéricamente igual a la cantidad de moles. La expresión de la constante de equilibrio y su valor numérico son:

$$K_C = \frac{[\text{PCl}_5]}{[\text{PCl}_3][\text{Cl}_2]} = 1.9$$





$$[Cl_2] = \frac{[PCl_5]}{K_C [PCl_3]} = \frac{(0.25)}{(1.9)(0.16)} = 0.82 [M]$$

b) Escriba la expresión para la constante de equilibrio de la ecuación escrita de esta manera y calcule su valor.

Al multiplicar la ecuación química por dos, se debe elevar el valor de  $K_C$  al cuadrado.

$$K_C' = \frac{[PCl_5]^2}{[PCl_3]^2 [Cl_2]^2} = (1.9)^2 = 3.61$$

c) Se utilizan los valores de concentración al equilibrio que se calcularon en el inciso a) en la expresión de  $K_C'$  y se despeja para obtener la concentración al equilibrio de  $Cl_2$ .

$$K_C' = \frac{[PCl_5]^2}{[PCl_3]^2 [Cl_2]^2} = (1.9)^2 = 3.61$$

$$[Cl_2]^2 = \frac{[PCl_5]^2}{K_C' [PCl_3]^2} = \frac{(0.25)^2}{(3.61)(0.16)^2} = 0.676 [M]^2$$

$$[Cl_2] = 0.82 [M]$$

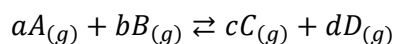
#### 7.4.5 Equilibrio en reacciones en fase gaseosa. Constante de equilibrio $K_p$

Las concentraciones de una reacción entre gases pueden ser expresadas en molaridades; sin embargo, también se describen por sus presiones parciales. Si se despeja la presión de la ecuación de los gases ideales  $PV = nRT$ , se obtiene:

$$P = \frac{n}{V}(RT) \quad \text{o} \quad P = M(RT)$$

La presión de un gas es directamente proporcional a su concentración ( $\frac{n}{V}$ ); por lo que la constante de equilibrio para mezclas de gases ideales puede expresarse como  $K_p$ , que es la razón que existe entre las presiones parciales de los productos obtenidos en la reacción y la de los reactivos.

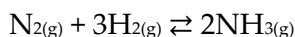
Para la reacción general:



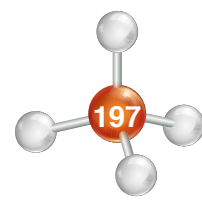
$$K_p = \frac{[P_C]^c [P_D]^d}{[P_A]^a [P_B]^b}$$

#### PROBLEMA TIPO:

En una mezcla en equilibrio a 500 [°C], se encontró que  $P_{NH_3(g)} = 0.147 [atm]$ ,  $P_{N_2(g)} = 6.00 [atm]$  y  $P_{H_2(g)} = 3.70 [atm]$ . Calcule el valor de  $K_p$  a 500 [°C] para la siguiente reacción.



$$K_p = \frac{(P_{NH_3})^2}{(P_{N_2})(P_{H_2})^3} = \frac{(0.147)^2}{(6.00)(3.70)^3} = 7.11 \times 10^{-5}$$





### 7.4.6 Relación entre $K_p$ y $K_c$

Si se reordena la ecuación de los gases ideales para obtener la molaridad:

$$\left(\frac{n}{V}\right) = \frac{P}{RT} \quad \text{o} \quad M = \frac{P}{RT}$$

y se sustituye  $P/RT$  por  $n/V$  en la expresión de  $K_c$ .

Se obtiene la expresión:  $K_p = K_c(RT)^{\Delta n} \quad \Delta n = (c + d) - (a + b)$

$$\Delta n = \sum (\text{moles de los productos}) - \sum (\text{moles de los reactivos})$$

Para las reacciones en fase gaseosa, se puede calcular la concentración de cada una de las sustancias usando el método de  $K_c$  o de  $K_p$ . Independientemente del método utilizado, el resultado debe de ser el mismo.

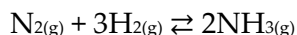
### 7.5 Principio de Le Châtelier

Este principio establece que "Si un factor externo perturba el equilibrio de un sistema de reacción, éste responde tratando de anular el efecto perturbador".

El equilibrio puede ser alterado por factores externos como un cambio de la temperatura, de la presión o de la concentración de uno de los reactivos o de los productos. Para cualquiera de estos casos, un sistema en equilibrio alcanzará un nuevo estado de equilibrio que contrarresta el efecto del cambio producido.

#### 1. Efecto sobre el equilibrio de un cambio de concentración.

Considere la mezcla de equilibrio de  $N_2$ ,  $H_2$  y  $NH_3$ .



La adición de  $H_2$  llevaría al sistema a desplazarse de modo que se reduzca la concentración recién aumentada de  $H_2$ . Esto sólo se consigue consumiendo  $H_2$  y también  $N_2$  al mismo tiempo, para formar más  $NH_3$ .

En la Figura 7.4 se observa cómo la adición de  $H_2$  a la mezcla en equilibrio provocará un desplazamiento hacia la formación de más  $NH_3$ . La eliminación de  $NH_3$  también provocaría un desplazamiento hacia la producción de más  $NH_3$ , en tanto que la adición de  $NH_3$  al sistema en equilibrio provocará que la reacción se desplace en el sentido que reduce la concentración de  $NH_3$ ; es decir, parte del amoníaco agregado se descompone en  $N_2$  y  $H_2$ .

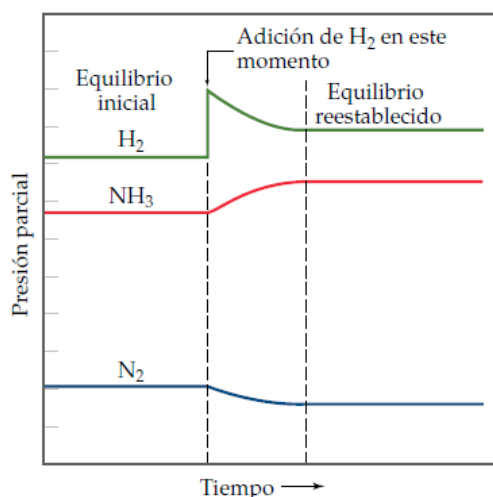


Figura 7.4. Representación de la reacción de desplazamiento del amoníaco.

#### 2. Efecto sobre el equilibrio de un cambio de presión o de volumen.

Si un sistema está en equilibrio y se reduce su volumen, con lo cual aumenta su presión total, el principio de Le Châtelier indica que el sistema responderá desplazando su posición de equilibrio a fin de reducir la presión. Un sistema puede reducir su presión disminuyendo el número total de moléculas de gas. Es por esto que, a temperatura constante, reducir el volumen de una mezcla gaseosa en equilibrio provoca que el sistema se desplace en la dirección que se reduce el número



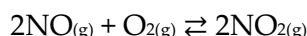


de moles de gas. A la inversa, un aumento de volumen provoca un desplazamiento en la dirección que se produce más moléculas de gas.

Se puede modificar la presión en un equilibrio de gases a temperatura constante en una de las siguientes maneras:

- Adicionando o eliminando uno de los reactivos gaseosos del sistema.
- Adicionando un gas inerte al sistema a volumen constante.
- Mediante un cambio de volumen del sistema.

Ejemplo: Si se tiene la siguiente reacción en equilibrio:



Y se aumenta la presión externa, disminuye el volumen de la mezcla de reacción y el equilibrio se desplaza hacia la formación de  $\text{NO}_2$  (g); es decir, hacia la derecha:  $\rightarrow$ .

Si se disminuye la presión externa, aumenta el volumen de la mezcla de reacción y el equilibrio se desplaza hacia la izquierda:  $\leftarrow$ .

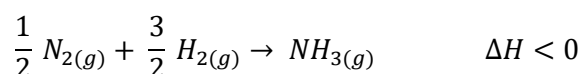
### 3. Efecto sobre el equilibrio de un cambio de temperatura.

Si ocurre un cambio en la temperatura, el efecto sobre el equilibrio consiste en un cambio de valor de la constante de equilibrio.

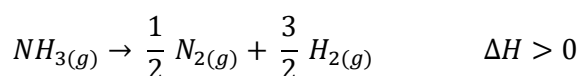
Si se aumenta la temperatura de un sistema químico en equilibrio, el sistema se desplaza en el sentido en que se absorbe calor, es decir, en el sentido de la reacción endotérmica.

Si se disminuye la temperatura de un sistema químico en equilibrio, el sistema reacciona en el sentido en que se desprende calor, es decir, en el sentido de la reacción exotérmica.

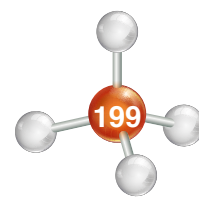
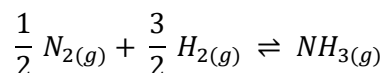
Por ejemplo: La reacción de obtención de amoníaco a 400 [°C] es exotérmica



Mientras que la reacción contraria a 400 [°C] es endotérmica



Si el sistema está en equilibrio un aumento de temperatura favorecería la descomposición del  $\text{NH}_3$  en  $\text{N}_2$  y  $\text{H}_2$  pues este proceso es endotérmico. Y a la inversa, una disminución de temperatura favorecería la formación de  $\text{NH}_3$ .





## 7.6 Autoevaluación

### Cuestionario de autoevaluación del Capítulo 7

#### Problemas de termoquímica

Instrucciones: Resuelva los siguientes ejercicios utilizando tablas termodinámicas de  $\Delta H_f^\circ$

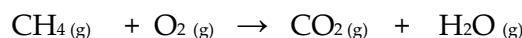
1. La reacción siguiente:



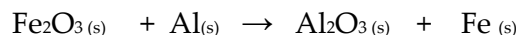
libera 700 kJ a partir de 14 g de  $\text{C}_2\text{H}_2$  y 77 g de NO en condiciones estándar. Determine:

- La cantidad de calor que se libera para un 100 % de rendimiento.
- El rendimiento porcentual de la reacción.

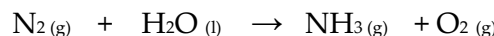
Para el proceso de obtención del  $\text{CO}_2$ , calcule el calor involucrado en condiciones estándar cuando reaccionan 64 [g] de metano con 6 [mol] de oxígeno gaseoso ( $\text{O}_2$ ).



2. Para el proceso de obtención del hierro sólido, calcule el calor involucrado en condiciones estándar cuando reaccionan 1344.5168 [g] de aluminio con 35 [mol] de óxido de hierro (III). La reacción es:



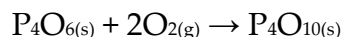
Determine el calor involucrado en la producción de 51 [g] de  $\text{NH}_3(\text{g})$ , cuando se hacen reaccionar 2.5 [mol]  $\text{N}_2(\text{g})$  con 140.4 [g]  $\text{H}_2\text{O}(\text{l})$  de acuerdo con la reacción siguiente:



#### Problemas de termoquímica con la ley de Hess

Instrucciones: Resuelva los siguientes ejercicios utilizando la ley de Hess. Justifique su procedimiento.

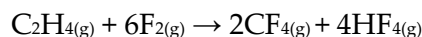
1. Calcule el cambio de entalpía para:



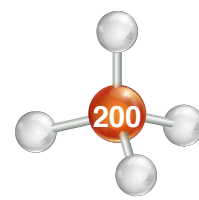
Dadas las siguientes entalpías de reacción:



2. Calcule el cambio de entalpía para la reacción:



Dadas las siguientes entalpías de reacción:

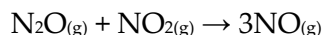




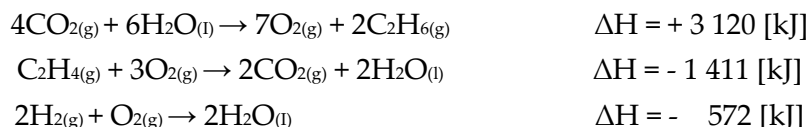
3. Dadas las siguientes reacciones:



Calcule el cambio de entalpía para la reacción:



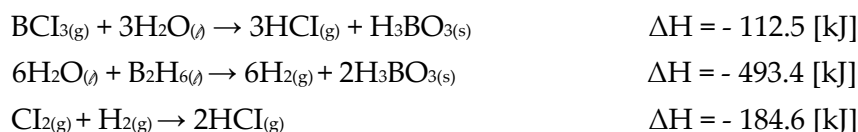
4. A partir de los datos siguientes:



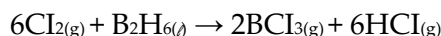
Calcule el calor involucrado en la siguiente reacción:



5. Con base en los datos de las reacciones siguientes:



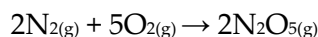
calcule el cambio de entalpía para la reacción.



6. A partir de los calores de reacción siguientes:

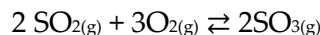


calcule el calor de reacción para:



### Problemas de equilibrio químico

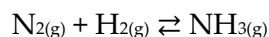
1. Una mezcla de  $\text{SO}_{2(\text{g})}$ ,  $\text{O}_{2(\text{g})}$  y  $\text{SO}_{3(\text{g})}$ , a  $380\text{ }^\circ\text{C}$ , se deja reaccionar hasta que alcanza el equilibrio:



Sabiendo que las concentraciones de cada una de las especies en equilibrio son las siguientes:  $[\text{SO}_2] = 3.07 \times 10^{-2} \text{ [M]}$ ,  $[\text{O}_2] = 6.12 \times 10^{-3} \text{ [M]}$ ,  $[\text{SO}_3] = 8.59 \times 10^{-2} \text{ [M]}$ ,

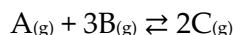
calcule  $K_C$  para la reacción a dicha temperatura.

2. A  $527\text{ }^\circ\text{C}$ , para la reacción:



Se tienen las siguientes concentraciones en el equilibrio:  $[\text{NH}_3] = 0.102 \text{ [M]}$ ,  $[\text{H}_2] = 1.62 \text{ [M]}$ ,  $[\text{N}_2] = 1.03 \text{ [M]}$ . Calcule  $K_C$  y  $K_p$ .

3. En un recipiente de  $10 \text{ [L]}$  se introducen  $2 \text{ [mol]}$  de  $A$  y  $1 \text{ [mol]}$  de  $B$ . Se calienta la mezcla a  $300\text{ }^\circ\text{C}$  y se establece el siguiente equilibrio:



Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

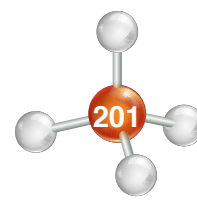
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

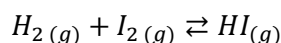
Cap. 22





Se sabe que cuando se alcanza el equilibrio, la concentración de la especie  $B$  es igual a la concentración de la especie  $C$ , calcule:

- Las concentraciones de cada una de las especies en el equilibrio.
  - El valor de  $K_p$  y  $K_c$  a  $300\text{ }^\circ\text{C}$ .
- El ácido fórmico ( $\text{HCO}_2\text{H}$ ) tiene una constante de disociación de  $1.8 \times 10^{-4}$  a  $25\text{ }^\circ\text{C}$ . Calcule las concentraciones de  $\text{HCO}_2\text{H}$ ,  $\text{HCO}_2^-$  y  $\text{H}_3\text{O}^+$  en el equilibrio para una disolución  $0.01\text{ [M]}$ .
  - Se coloca en un recipiente de  $5\text{ [L]}$  a  $448\text{ }^\circ\text{C}$  una mezcla de  $5.00 \times 10^{-3}\text{ [mol]}$  de  $\text{H}_2(\text{g})$  y  $1.00 \times 10^{-2}\text{ [mol]}$  de  $\text{I}_2(\text{g})$  y se deja que llegue al equilibrio. El análisis de la mezcla en equilibrio muestra que la concentración de  $\text{HI}(\text{g})$  es  $1.87 \times 10^{-3}\text{ [M]}$ . Calcule  $K_c$  para la reacción a dicha temperatura:



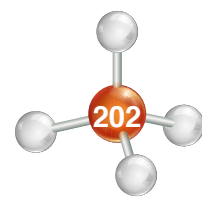
- Un recipiente de  $306\text{ [cm}^3\text{]}$  de capacidad contiene, a  $35\text{ }^\circ\text{C}$ , una mezcla gaseosa en equilibrio de  $0.384\text{ [g]}$  de  $\text{NO}_2$  y  $1.653\text{ [g]}$  de  $\text{N}_2\text{O}_4$ . Calcule las constantes de equilibrio  $K_p$  y  $K_c$  de la reacción de disociación del  $\text{N}_2\text{O}_4$ .

### Problemas de equilibrio químico con principio de Le Châtelier

- Una mezcla gaseosa constituida inicialmente por  $7.94\text{ [M]}$  de hidrógeno y  $5.30\text{ [M]}$  de vapor de yodo, se calienta a  $450\text{ }^\circ\text{C}$ , con lo que se forman en el equilibrio  $9.52\text{ [M]}$  de  $\text{HI}$ . El  $\Delta\text{H}$  de la reacción es  $-2.6\text{ [kJ]}$ .
  - Indique la reacción reversible correspondiente a este proceso, señalando cómo se modificará el estado de equilibrio al aumentar la temperatura y la presión.
  - Determine la constante de equilibrio.
- Teniendo en cuenta que la oxidación de la glucosa ( $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$ ) es un proceso exotérmico, indicar el desplazamiento del equilibrio si se llevan a cabo las siguientes modificaciones:
  - Aumento de la concentración de  $\text{CO}_2$ .
  - Disminución a la mitad de la concentración de glucosa.
  - Aumento de la presión.
  - Aumento de la temperatura.
- En un recipiente vacío es introducida una determinada cantidad de bicarbonato de sodio ( $\text{NaHCO}_3$ ) y tras calentar a  $160\text{ }^\circ\text{C}$ , cuando se alcanza el equilibrio la presión en el interior del recipiente es de  $2.42\text{ [atm]}$ . Calcular las constantes de equilibrio  $K_p$  y  $K_c$ .
- A  $300\text{ [K]}$  la constante de equilibrio  $K_c$  de la siguiente reacción es de  $4.5 \times 10^{-3}$ . Sin variar la temperatura, se introducen  $1.2\text{ [mol]}$  de  $\text{N}_2\text{O}_4$  en un recipiente de  $2.6\text{ [L]}$ :



- Calcule las concentraciones en el equilibrio
- Si una vez alcanzado el equilibrio la presión se duplica, describa hacia dónde se desplaza el equilibrio.
- Establezca cuánto valen las nuevas concentraciones.





### Cuestionario de autoevaluación del tema 7.2

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

1. Para convertir la unidad común caloría a la unidad internacional Joule se debe usar la equivalencia:  $1 \text{ [cal]} = 4.18 \text{ [J]}$ . Por lo tanto  $100 \text{ [cal]}$  son:

- a) 418 [J]                      b) 0.48 [J]                      c) 4.0 [J]                      d) 4.18 [J]

2. Una reacción exotérmica es:

- a) Aquella en la que se produce un incremento de entalpía positivo  
b) Aquella que necesita energía para que se produzca  
c) Aquella en la que los reactivos poseen más entalpía que los productos de la reacción  
d) Aquella que se produce espontáneamente

3. Si la variación de entalpía presenta un signo positivo, entonces la reacción es:

- a) Equivalente              b) Endotérmica              c) Exotérmica              d) Espontánea

4. Indique cuál de las siguientes afirmaciones es verdadera: "Una reacción endotérmica:

- a) Es aquella en la cual la entalpía de reacción es negativa ( $\Delta H < 0$ )  
b) Es aquella en la que los reactivos tienen más energía que los productos  
c) Es aquella en la que se produce una liberación de calor  
d) Es aquella que enfría el recipiente donde se efectúa, ya que absorbe calor

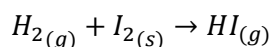
5. Especie que posee  $\Delta H_f^0 = 0$  en condiciones estándar:

- a) O                      b)  $O^{2+}$                       c)  $O_2$                       d)  $O^{2-}$

### Cuestionario de autoevaluación del tema 7.3

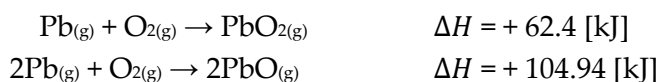
Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

1. Se sabe que cuando se forman 2 [mol] de yoduro de hidrógeno gaseoso ( $HI_{(g)}$ ) a partir de 1 [mol] de hidrógeno gaseoso ( $H_{2(g)}$ ) y 1 [mol] de yodo sólido ( $I_{2(s)}$ ) se absorben 12.4 [kJ]. Teniendo en cuenta estos datos, deduzca la entalpía de reacción para 1 [mol] de yoduro de hidrógeno gaseoso:



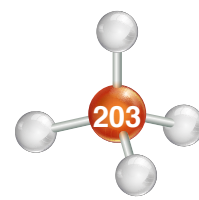
- a)  $\Delta H = +12.4 \text{ [kJ]}$     b)  $\Delta H = -12.4 \text{ [kJ]}$     c)  $\Delta H = +6.2 \text{ [kJ]}$     d)  $\Delta H = -6.2 \text{ [kJ]}$

2. Dadas las reacciones siguientes:



calcule el incremento de la entalpía de la reacción para:  $2PbO + O_2 \rightarrow 2PbO_2$

- a)  $\Delta H = +19.86 \text{ [kJ]}$                       b)  $\Delta H = -19.86 \text{ [kJ]}$



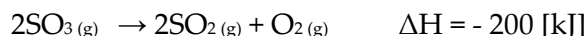
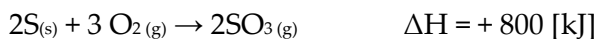




c)  $\Delta H = +167.34$  [kJ]

d)  $\Delta H = -167.34$  [kJ]

3. Tomando en cuenta los siguientes datos:



el valor de  $\Delta H$  para la reacción:  $S_{(s)} + O_{2(g)} \rightarrow SO_{2(g)}$  será igual a:

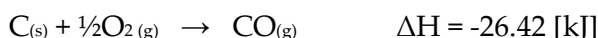
a)  $\Delta H = +500$  [kJ]

b)  $\Delta H = +300$  [kJ]

c)  $\Delta H = +600$  [kJ]

d)  $\Delta H = +1200$  [kJ]

4. Calcule el calor de combustión de la reacción:  $C_{(s)} + \frac{1}{2}O_{2(g)} \rightarrow CO_{(g)}$ , conociendo los datos siguientes:



a)  $\Delta H = +67.63$  [kJ]

b)  $\Delta H = +120.47$  [kJ]

c)  $\Delta H = -67.63$  [kJ]

d)  $\Delta H = -120.47$  [kJ]

5. Calcule el calor de la reacción:  $\frac{1}{2}N_{2(g)} + O_{2(g)} \rightarrow NO_{2(g)}$  a partir de los datos siguientes:



a)  $\Delta H = +147.32$  [kJ]

b)  $\Delta H = -33.18$  [kJ]

c)  $\Delta H = -147.32$  [kJ]

c)  $\Delta H = +33.18$  [kJ]

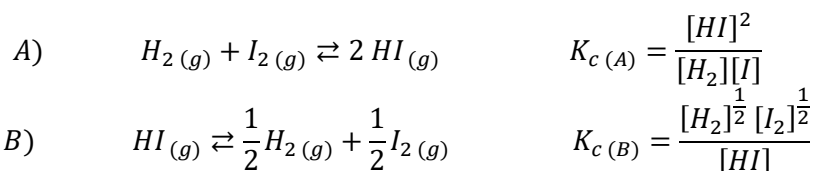
### Cuestionario de autoevaluación del tema 7.4

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

1. En una reacción en la cual se ha alcanzado el equilibrio químico, se cumple la siguiente premisa:

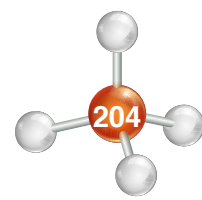
- a) La reacción química ha finalizado
- b) El valor de la constante depende de las concentraciones iniciales
- c) El valor de la constante permanece inalterado mientras no se cambie la temperatura
- d) Todos los componentes deben de tener la misma concentración

2. Se da el equilibrio químico entre el yodo, hidrógeno y yoduro de hidrógeno, todos gases, expresado de las formas siguientes:



Si se comparan los valores de las constantes  $K_c$  para ambas expresiones, se puede decir que:

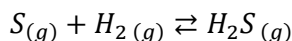
- a) Son iguales, pues no hay variación en el número de moles
- b)  $K_{c(A)} = K_{c(B)}^2$
- c)  $K_{c(A)} = 1/K_{c(B)}^2$





d) Son inversas:  $K_{c(A)} = 1/K_{c(B)}$

3. Dado el siguiente equilibrio químico, indique cuál de las siguientes expresiones es verdadera:



a)  $K_p = K_c$

b)  $K_p = K_c(RT)^{-1}$

c)  $K_p = K_c(RT)$

c)  $K_p = K_c(nRT)^{-1}$

4. A 25 [°C] se estableció el siguiente equilibrio entre las sustancias A, B, C y D, todas en fase acuosa a esa temperatura, siendo los moles de cada una de las especies en el equilibrio, los que se indican a continuación:

A	+	B	⇌	3 C	+	D
1 [mol]		1 [mol]		1 [mol]		0.5 [mol]

Indique cuál será el valor de la constante de equilibrio  $K_c$ , sabiendo que el volumen total es de 2 [L]:

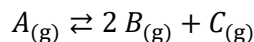
a) 0.125

b) 0.075

c) 0.5

d) 0.75

5. En un recipiente de 2 [L] se introducen 0.6 [mol] de una sustancia gaseosa A. Una vez alcanzado el equilibrio quedan 0.2 [mol] de A. Indique cuál será el valor de la constante de equilibrio  $K_c$  para la reacción:



a) 0.16

b) 0.32

c) 1.28

d) 0.6

### Cuestionario de autoevaluación del tema 7.5

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

1. Dada la siguiente reacción:  $COCl_{2(g)} \rightleftharpoons CO_{(g)} + Cl_{2(g)}$ ,  $\Delta H > 0$ , para que la reacción se desplace hacia la derecha se puede:

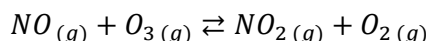
a) Disminuir la temperatura del recipiente de la reacción y elevar la presión

b) Aumentar la cantidad de  $CO_{(g)}$

c) Extraer  $COCl_{2(g)}$

d) Aumentar la temperatura y disminuir la presión del sistema

Una cierta cantidad de monóxido de nitrógeno, NO; ozono,  $O_3$ , dióxido de nitrógeno,  $NO_2$ ; y oxígeno,  $O_2$ , todas en fase gaseosa, se encuentran en equilibrio en un recipiente; de acuerdo con la reacción, el equilibrio se desplaza hacia la derecha cuando:



a) Disminuye la concentración de NO

b) Disminuye la concentración de  $O_3$

c) Aumenta la concentración de  $NO_2$

d) Se reduce la concentración de  $O_2$

2. Para la reacción:  $H_{2(g)} + Br_{2(g)} \rightleftharpoons 2 HBr_{(g)}$ , de la cual se sabe que, a 700 [K],  $K_c = 57$ , puede afirmarse que:

a) Al aumentar la presión se modifica el valor de la constante de equilibrio

b) El valor de  $K_c$  para la reacción inversa es -57

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

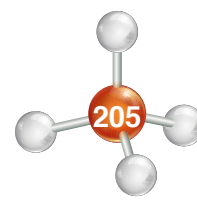
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

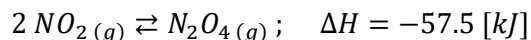
Cap. 22





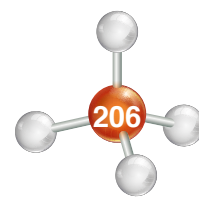
- c) El aumento de la concentración de  $H_2$  disminuye la concentración de  $Br_2$
- d) El aumento de la concentración de  $H_2$  eleva la concentración de  $Br_2$ , siempre y cuando exista un catalizador apropiado

4. Acerca de la reacción exotérmica de formación del tetróxido de dinitrógeno



se puede afirmar:

- a) Que está favorecida a bajas temperaturas y altas presiones
  - b) Los valores de  $K_p$  y  $K_c$  son iguales
  - c) Las variaciones de la temperatura no afectan al equilibrio
  - d) La disminución de la presión favorece la reacción directa
5. La ley o principio de Le Châtelier establece que:
- a) Al alterar las condiciones de un sistema en equilibrio, éste tiende a evolucionar en el sentido de restablecer el estado original
  - b) Al variar la presión de un sistema reaccionante, éste se desplaza hacia el extremo de la reacción en que haya menor número de moles
  - c) Si se aumenta la concentración de un reactivo en un sistema cerrado en equilibrio, las de los restantes reactivos, en caso de haberlos, tienden a disminuir
  - d) Si se varía la presión de un sistema reaccionante que contiene cantidades iguales de moles en ambos miembros de la ecuación química, el sistema permanece inalterado





# Capítulo 8

## Electroquímica

Ana Laura Pérez Martínez, Wladimir Guevara González

### 8.1 Introducción

La electroquímica es una de las ramas de la química que estudia la transformación de energía obtenida por un cambio químico a energía eléctrica o viceversa, como consecuencia de la movilidad de electrones en las reacciones de óxido-reducción.

Este campo considera básicamente dos tipos de procesos:

- Electrolíticos
- Galvanicos o voltáicos (Pilas)

La diferencia entre ellos es que en los procesos electrolíticos las reacciones químicas ocurren al hacer pasar una corriente eléctrica y los que se conocen como pilas involucra reacciones químicas que dan como resultado la producción de energía eléctrica.

### Sumario

#### 8.1 Introducción

#### 8.2 La electricidad y las reacciones óxido-reducción espontáneas y no espontáneas

#### 8.3 Potencial estándar de reducción. Serie de actividad

#### 8.4 Pilas voltaicas. Reacción iónica total. Potencial de pila. Diagrama de la pila

#### 8.5 Celdas electrolíticas: Leyes de Faraday. Galvanización. Electrodeposición

#### 8.6 Corrosión. Inhibidores. Protección catódica

#### 8.7 Aplicaciones de electroquímica para Minas y Metalurgia

#### 8.8 Autoevaluación

### 8.2 La electricidad y las reacciones óxido-reducción espontáneas y no espontáneas

#### 8.2.1 La electricidad

La electricidad es un tipo de energía, por lo que, se puede entender como la capacidad para realizar un trabajo. Se define como el flujo de electrones impulsados por una diferencia de potencial, mediante un conductor que facilita este movimiento (Figura 8.1).

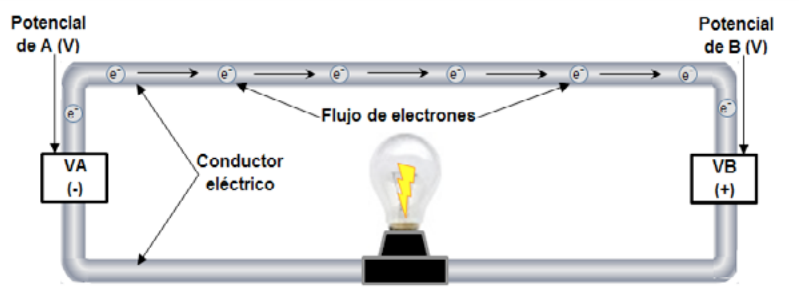


Figura 8.1. Generación de electricidad. En esta figura se muestra un conductor, donde se representa la transferencia de electrones entre cada átomo que compone al conductor, como el caso de los metales que los electrones están débilmente unidos al núcleo del átomo y esto facilita la migración de uno a otro. Esta reacción es impulsada por la diferencia de potencial entre A y B, generándose así luz eléctrica.



Toda la materia está formada por átomos, los cuales, a su vez, se encuentran constituidos por tres partículas subatómicas: neutrones, protones y electrones. Los protones y electrones están cargados eléctricamente: son positivos y negativos respectivamente. En los últimos niveles de energía del átomo se encuentran los electrones más expuestos, llamados *electrones de valencia*, responsables de los cambios químicos.

Este tipo de energía puede ser encontrada de dos maneras diferentes: *electricidad estática* y *corriente eléctrica*. La electricidad estática se refiere a la acumulación en exceso de carga eléctrica debido a la mala conductividad en el medio, por lo que hasta que se pone en contacto con algún buen conductor ocurre la descarga.

La corriente eléctrica discurre con cargas eléctricas en movimiento, debido a que el circuito se cierra y tenemos energía de manera continua hasta que el interruptor se abra.

### 8.2.2 Reacciones óxido-reducción

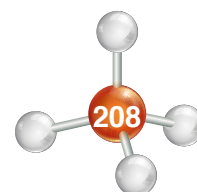
Las reacciones de óxido-reducción son reacciones químicas en las que hay, simultáneamente, pérdida y ganancia de electrones entre reactivos y productos. Durante este proceso ocurre un cambio en el número de oxidación de algunos elementos, debido a la transferencia de electrones del átomo que se oxida al átomo que se reduce.

El número de oxidación de un elemento es un número entero que puede ser cero, positivo o negativo y representa hipotéticamente el número de electrones ganados, perdidos o compartidos de manera individual para cada átomo. Cuando existe un número de oxidación cero significa que el átomo es neutro, por lo que existe un equilibrio eléctrico, ya que es el mismo número de electrones que el de los protones. Un número de oxidación positivo indica que el átomo ha perdido electrones, los cuales tienen menor número que los protones y, por último, un número de oxidación negativo indica que el átomo ha ganado electrones y son de mayor número que los protones.

En la Tabla 8.1 son observables los números de oxidación para algunos iones comunes (una lista más completa de iones comunes se encuentra en el apéndice A). En el caso de los compuestos, cada elemento tendrá un número de oxidación con diferente signo; sin embargo, todo el compuesto tiene que estar eléctricamente neutro. Una vez conocido el número de oxidación para el ion más común, el número de oxidación del otro ion que está presente en el compuesto se puede obtener del siguiente ejercicio.

Números de oxidación de iones comunes			
Nombre del elemento	Símbolo químico	Ion más común	Número de oxidación
Hidrógeno	H	$H^+$	+1
Potasio	K	$K^+$	+1
Sodio	Na	$Na^+$	+1
Litio	Li	$Li^+$	+1
Plata	Ag	$Ag^+$	+1
Cobre	Cu	$Cu^{2+}$	+2
Calcio	Ca	$Ca^{2+}$	+2
Bario	Ba	$Ba^{2+}$	+2
Hierro	Fe	$Fe^{2+}$	+2
Magnesio	Mg	$Mg^{2+}$	+2
Cinc	Zn	$Zn^{2+}$	+2
Aluminio	Al	$Al^{3+}$	+3
Hierro	Fe	$Fe^{3+}$	+3
Fosforo	P	$P^{3-}$	-3
Sulfuro	S	$S^{2-}$	-2
Óxígeno	O	$O^{2-}$	-2
cloruro	Cl	$Cl^-$	-1
Bromuro	Br	$Br^-$	-1
Fluoruro	F	$F^-$	-1
Yoduro	I	$I^-$	-1

Tabla 8.1. Números de oxidación de iones comunes.







**PROBLEMA TIPO:**

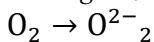
Determinar el número de oxidación del carbono en el dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>).

Solución:

1. Se utiliza la siguiente ecuación: (El compuesto CO<sub>2</sub> es eléctricamente neutro).

$$C + O_2 = 0 \dots\dots\dots \text{Ec. 8.1}$$

2. Se escribe el número de oxidación del ion de oxígeno, que es el ion común según la tabla 8.1.



3. Se hace la multiplicación del número de oxidación y número de iones, debido a que el 2 en la forma química de CO<sub>2</sub>, indica que existen 2 iones de O, por cada uno de C.

$$O_2 = (-2)(2) = -4 \dots\dots\dots \text{Ec. 8.2}$$

4. Se sustituye el número obtenido de la ecuación 8.2, en la ecuación 8.1 y se despeja la variable del carbono.

$$C + (-4) = 0 \rightarrow C = +4 \dots\dots\dots \text{Ec. 8.3}$$

Por tanto, el número de oxidación del C es +4, en el CO<sub>2</sub>.

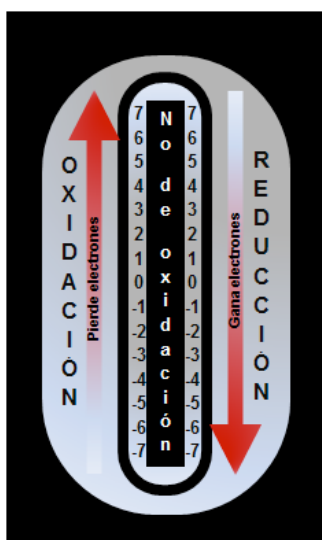


Figura 8.2. Simultaneidad de Oxidación y Reducción.

La oxidación se presenta cuando el número de oxidación aumenta y debido a que se pierden electrones, mientras que en la reducción el número de oxidación disminuye debido a la ganancia de electrones (ver Figura 8.2).

Originalmente la palabra *oxidación* estaba referida al fenómeno de la combinación del oxígeno con algún elemento para producir un óxido, en tanto que la palabra *reducción* se empleó para referirse a la eliminación del oxígeno de un óxido para dejar en su estado puro a un elemento.

En una reacción química nunca se obtendrá la oxidación de una especie química, sin que ocurra la reducción en la otra especie, ya que estos dos fenómenos ocurren simultáneamente. Con la existencia de una, ocurrirá la otra.

La sustancia que provoca que la otra sustancia se oxide es el **agente oxidante**. Esto se debe a que este agente toma los electrones y se reduce. El **agente reductor** o simplemente **reductor** es la sustancia que tiende a perder electrones y, por consiguiente, se oxida.

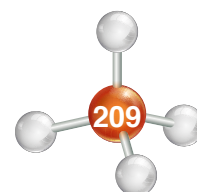
**PROBLEMA TIPO:**

El cloruro de potasio (KCl), también conocido como mineral Silvita y el fluoruro de calcio (CaF<sub>2</sub>) o Fluorita, son minerales comunes. Para ambos compuestos:

- a) Determine el número de oxidación de cada especie química.
- b) Escriba las ecuaciones químicas que describan la oxidación y reducción, para obtener de las especies iónicas los elementos neutros, así como las reacciones globales.

**Estrategia de solución:**

Buscar en la tabla 8.1, los iones comunes de los compuestos proporcionados y, posteriormente, se observa cuál de las especies está ganando e<sup>-</sup> y cuál perdiendo, según su número de oxidación.



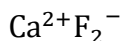


Solución

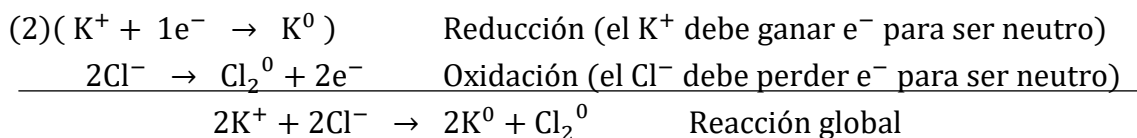
a) En el KCl ambas especies son iones comunes. Por tanto, sólo se toma el valor para cada una.



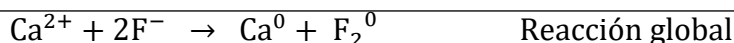
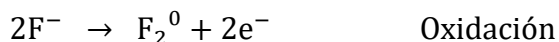
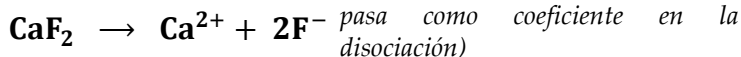
En el mineral CaF<sub>2</sub>, también ambas especies son iones comunes, sólo que el flúor (F) se encuentra al doble de la cantidad con respecto calcio (Ca), debido a que el ion Ca<sup>2+</sup> cuenta con una deficiencia de 2e<sup>-</sup>, para compensarlo, el F<sup>-</sup>, el cual tiene un exceso de 1e<sup>-</sup>, se debe presentar al doble, para así obtener un compuesto eléctricamente neutro.



b) Para encontrar las reacciones de reducción y oxidación a partir de las especies involucradas se deben escribir como reactivos las especies químicas contenidas en los minerales y después observar si se deben ganar o perder e<sup>-</sup> para llegar a un número de oxidación cero. En el caso de ganar e<sup>-</sup> se deben poner esta como parte de los reactivos y si se deben perder e<sup>-</sup> se escribirán como productos.



(Siempre el subíndice del compuesto pasa como coeficiente en la disociación)



### 8.3 Potencial estándar de reducción. Serie de actividad

#### 8.3.1 Potencial estándar de reducción

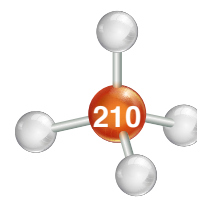
Un electrodo es una pieza de metal en una disolución, si la disolución; contiene iones del mismo metal (M<sup>n+</sup>) se denomina *semicelda*.

Existen dos tipos de electrodos: el *ánodo* y el *cátodo*, nombres asignados dependiendo de si existe oxidación o reducción en cada uno de ellos. Al electrodo donde ocurre la oxidación se le llama *ánodo* y donde ocurre la reducción se le llama *cátodo*.

Un electrodo es *estándar* si la temperatura es de 25 [°C], la concentración de las especies disueltas es 1 [M] y la presión de los gases es de 1 [atm].

El *potencial estándar de electrodo* (E<sup>0</sup>) mide la tendencia que tiene un electrodo para generar un proceso de reducción y se le llama *potencial estándar de reducción*. La diferencia de potencial proporciona la fuerza motriz para mover los electrones a través de un circuito externo de una celda y es llamado *fuerza electromotriz* (Fem) o *potencial de celda* (E<sub>celda</sub>).

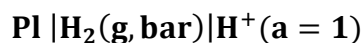
Por convención internacional, los potenciales estándar de electrodo se toman como semirreacciones de reducción, las cuales indican la tendencia de los electrodos a comportarse como cátodos frente al electrodo estándar de hidrógeno (EEH).





El EEH tiene un equilibrio entre iones hidronio ( $H_3O^+$ ) en disolución con actividad igual a uno y moléculas de  $H_2$  en estado gaseoso a 1 [bar] de presión, equilibrio establecido sobre la superficie de un metal inerte como el platino. La reacción en equilibrio produce un potencial en la superficie del platino, al cual se le da el valor de cero (ver figura 8.3).

El esquema de la semicelda puede ser representado como:



Tener dos líneas indica que existen tres fases presentes: el platino sólido, el hidrógeno no gaseoso y el ion hidrógeno en disolución acuosa. Para mayor facilidad se escribe  $H^+$  en lugar de  $H_3O^+$  y se supone que para una concentración de  $H^+ = 1 [M]$  hay actividad promedio igual a la unidad ( $a=1$ ) y se sustituye la presión de 1 [bar] por 1 [atm].

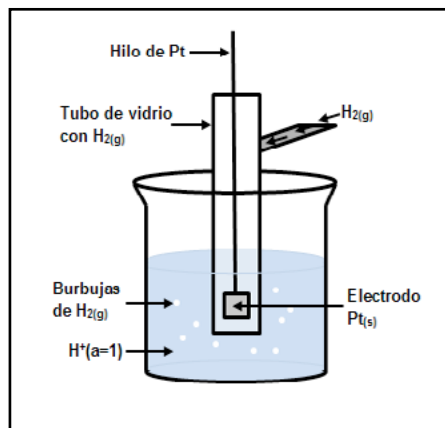


Figura 8.3. Electrodo estándar de hidrógeno (EEH).

Para determinar el valor de  $E^0$  para algún electrodo estándar, debe ser comparado con el electrodo estándar de hidrógeno (EEH), de manera que en esta comparación el EEH siempre será el ánodo y el electrodo a comparar será el cátodo. En la celda en que se está realizando la reacción se tomará la lectura de la diferencia de potencial entre el EEH y el electrodo a comparar, debido a los electrones que están fluyendo del ánodo al cátodo. Finalmente, para obtener el **potencial estándar de reducción** de algún elemento se utilizará la siguiente fórmula una vez conocido el potencial de celda.

$$E^0_{\text{celda}} = E^0_{(\text{cátodo})} - E^0_{(\text{ánodo})} \dots \dots \dots \text{Ec. 8.4}$$

Para este caso especial que se va a conocer el valor de un electrodo estándar a partir de la comparación con el EEH, será utilizada la fórmula de la siguiente manera:

$$E^0_{\text{celda}} = E^0_{(\text{electrodo a comparar})} - E^0_{(\text{EEH})} \dots \dots \dots \text{Ec. 8.5}$$

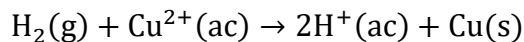
Si el  $E^0_{(\text{EEH})} = 0$ , entonces el valor que tendría el potencial de celda en el voltímetro es el valor de  $E^0_{(\text{electrodo a comparar})}$ .

$$E^0_{\text{celda}} = E^0_{(\text{electrodo a comparar})} - 0 \dots \dots \dots \text{Ec. 8.6}$$

Por ejemplo, para el caso del  $Cu^{2+}$  la semirreacción estándar de reducción se puede escribir:



La reacción en la celda es:



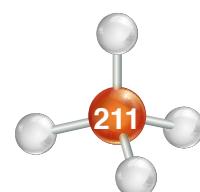
Donde tienen lugar las siguientes semirreacciones y la reacción de la celda.

(ánodo, donde ocurre la oxidación)	$H_2 \rightarrow 2H^+ + 2e^-$	$E^0 = 0$
(cátodo, donde ocurre la reducción)	$Cu^{2+} + 2e^- \rightarrow Cu$	$E^0 = 0.337$
(reacción de celda)	$H_2(g) + Cu^{2+}(ac) \rightarrow 2H^+(ac) + Cu(s)$	$E_{\text{celda}} = 0.337$

De manera general el electrodo estándar de hidrógeno se fija exactamente en 0 [V].

Se pueden observar dos casos cuando un elemento es comparado con el EEH.

- Que el compuesto comparado sea más reductor y por lo tanto  $E^0_{\text{reductor}}$  es positiva y la semirreacción se lleva a cabo de forma directa.





- Que el compuesto comparado sea menos reductor y por lo tanto  $E^0_{\text{reductor}}$  es negativo y la semirreacción se lleva a cabo de forma inversa.

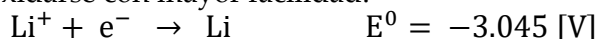
La Tabla 8.2 ofrece algunos valores comunes de potencial estándar de reducción y, en el anexo, se proporciona una tabla más completa. Cuanto más positivo sea el valor del  $E^0$ , mayor es la tendencia del compuesto a reducirse, por lo que el elemento es un agente oxidante más fuerte.

En el apéndice A se encuentra una tabla más completa de potenciales estándar de reducción  $E^0$  a 25° C.

Según la tabla, el flúor ( $F_2$ ) es el agente más oxidante porque tiene la mayor tendencia a reducirse y se encuentra hasta el final del gráfico.



En el principio de la tabla, se entra el Litio, el cual es el agente más reductor y, por tanto, el compuesto que tiende a oxidarse con mayor facilidad.



Elemento	Semirreacción de reducción	Potencial estándar de reducción [V]
Li	$Li^+ + e^- \rightarrow Li$	-3.045
K	$K^+ + e^- \rightarrow K$	-2.925
Ca	$Ca^{2+} + 2e^- \rightarrow Ca$	2.870
Na	$Na^+ + e^- \rightarrow Na$	-2.714
Mg	$Mg^{2+} + 2e^- \rightarrow Mg$	-2.370
Al	$Al^{3+} + 3e^- \rightarrow Al$	-1.660
Zn	$Zn^{2+} + 2e^- \rightarrow Zn$	-0.763
Cr	$Cr^{3+} + 3e^- \rightarrow Cr$	-0.740
Fe	$Fe^{2+} + 2e^- \rightarrow Fe$	-0.440
Cd	$Cd^{2+} + 2e^- \rightarrow Cd$	0.403
Ni	$Ni^{2+} + 2e^- \rightarrow Ni$	-0.250
Sn	$Sn^{2+} + 2e^- \rightarrow Sn$	-0.140
Pb	$Pb^{2+} + 2e^- \rightarrow Pb$	-0.126
H <sub>2</sub>	$2H^+ + 2e^- \rightarrow H_2$	0.000
Cu	$Cu^{2+} + 2e^- \rightarrow Cu$	+0.337
I <sub>2</sub>	$I_2 + 2e^- \rightarrow 2I^-$	+0.535
Hg	$Hg^{2+} + 2e^- \rightarrow Hg$	+0.789
Ag	$Ag^+ + e^- \rightarrow Ag$	+0.799
Br <sub>2</sub>	$Br_2 + 2e^- \rightarrow 2Br^-$	+1.080
Cl <sub>2</sub>	$Cl_2 + 2e^- \rightarrow 2Cl^-$	+1.360
Au	$Au^{3+} + 3e^- \rightarrow Au$	+1.500
F <sub>2</sub>	$F_2 + 2e^- \rightarrow 2F^-$	+2.870

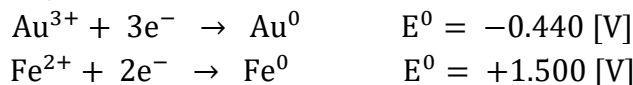
Tabla 8.2. Potenciales estándar de reducción

**PROBLEMA TIPO:**

Se tienen dos electrodos, uno de oro (Au) y otro de hierro (Fe), determine cuál usaría como ánodo y cuál como cátodo para obtener el  $E^0_{\text{celda}}$  positivo e identifique que especie se oxida y cuál se reduce, así como los agentes oxidantes y reductores.

Solución

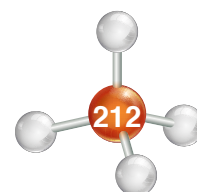
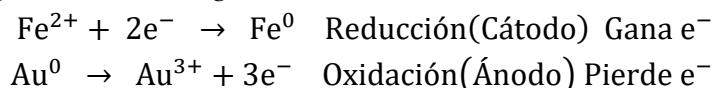
Según la tabla 8.2, se tiene que:



Según la ecuación (8.4) el potencial estándar de la celda se puede calcular como:

$$E^0_{\text{celda}} = E^0_{\text{(cátodo)}} - E^0_{\text{(ánodo)}}$$

Para tener un  $E^0_{\text{celda}}$  positivo, necesariamente el Fe debe de ser el cátodo y el Au el ánodo, por lo que el Fe se reduce (agente oxidante) y el Au se oxida (agente reductor).

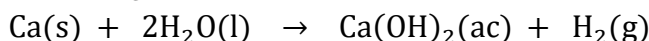




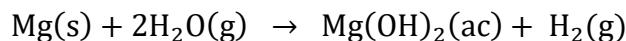
### 8.3.2 Serie de actividad

La *serie de actividad de los metales*, también conocida como *serie electromotriz* o *serie electroquímica*, es una lista que de acuerdo con su actividad química posiciona a los metales de mayor a menor y de arriba hacia abajo respectivamente. La actividad química se refiere a la facilidad con la que los elementos se oxidan o pierden electrones. De este modo, el elemento con mayor tendencia a oxidarse aparece primero, en la parte superior de la lista, como se representa en la Tabla 8.3.

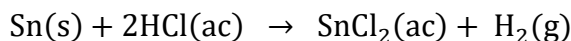
Los metales, hasta la posición del calcio (Ca), son los más activos y desplazan al hidrógeno incluso del agua, como se observa en la siguiente reacción:



Los metales situados después del calcio, hasta el hierro (Fe), desplazan al hidrógeno del vapor de agua a altas temperaturas.



Asimismo, los metales que le siguen del Fe hasta el Pb, desplazan al hidrógeno de ácidos.



Facilidad para perder electrones	k	→ K <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	ELECTROPPOSITIVOS	
	Ba	→ Ba <sup>2+</sup> + 2e <sup>-</sup>		
	Ca	→ Ca <sup>2+</sup> + 2e <sup>-</sup>		
	Na	→ Na <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>		
	Mg	→ Mg <sup>2+</sup> + 2e <sup>-</sup>		
	Al	→ Al <sup>3+</sup> + 3e <sup>-</sup>		
	Zn	→ Zn <sup>2+</sup> + 2e <sup>-</sup>		
	Cr	→ Cr <sup>3+</sup> + 3e <sup>-</sup>		
	Fe	→ Fe <sup>2+</sup> + 2e <sup>-</sup>		
	Ni	→ Ni <sup>2+</sup> + 2e <sup>-</sup>		
	Sn	→ Sn <sup>2+</sup> + 2e <sup>-</sup>		ELECTRONEGATIVOS
	Pb	→ Pb <sup>2+</sup> + 2e <sup>-</sup>		
	H <sub>2</sub>	→ 2H <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>		
	Cu	→ Cu <sup>2+</sup> + 2e <sup>-</sup>		
	As	→ As <sup>3+</sup> + 3e <sup>-</sup>		
Ag	→ Ag <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>			
Hg	→ Hg <sup>2+</sup> + 2e <sup>-</sup>			
Au	→ Au <sup>3+</sup> + 3e <sup>-</sup>			

Finalmente, los metales situados por debajo del hidrógeno no lo desplazan de ninguna manera. La serie de actividad de los metales indica si una reacción ocurre o no, sin cálculos y sólo con observar la posición del metal en ella. Además de predecir si ocurre desplazamiento de hidrógeno o no, también se puede saber si ocurre un desplazamiento de un metal a otro en una sal, ya que el que se encuentra en una posición superior en la serie puede desplazar al que le sigue o a cualquiera de los que están más abajo, como en las reacciones siguientes:

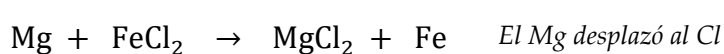
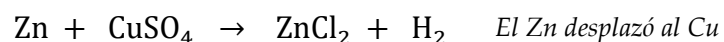
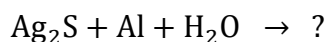


Tabla 8.3. Serie de actividad de los metales

#### PROBLEMA TIPO:

La Argentita es un mineral de plata de fórmula Ag<sub>2</sub>S. Prediga que sucederá al ponerla en contacto con aluminio metálico (Al) y vapor de agua (H<sub>2</sub>O). Escriba las semirreacciones de óxido-reducción y la reacción global.



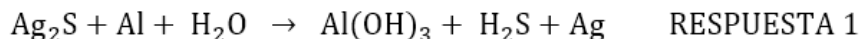
Solución:

El aluminio por ser un metal activo según la serie de actividad desplaza al hidrógeno (H) de la molécula del agua cuando se encuentra como vapor, incluso será más activo con el vapor de agua, que con el sulfuro de plata y el aluminio (Al), forma el hidróxido de aluminio (Al(OH)<sub>3</sub>).

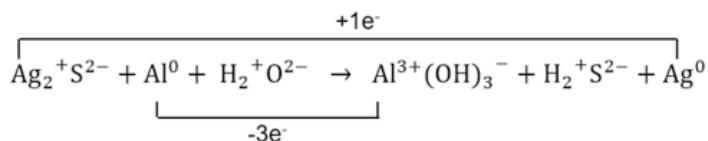




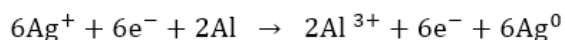
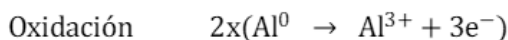
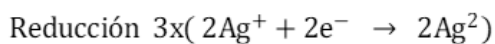
Los iones  $H^+$  libres reaccionan con el azufre (S) del sulfuro ( $Ag_2S$ ), ya que, por diferencia de electronegatividad, el azufre es más estable unido al  $H^+$  que a la  $Ag^+$ .



Si se realiza el análisis en los cambios de número de oxidación de cada especie, se detecta que solamente la plata y el aluminio presentan dichas variaciones.



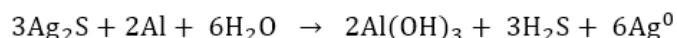
Recuerde que se deben de generar el mismo número de  $e^-$  que los que se producen.



La plata pasa de ser un ion con carga 1- a plata metálica, por lo que por cada ion de plata se gana  $1e^-$ ; el subíndice 2 pasa como coeficiente estequiométrico en la semirreacción y para cumplir con el balanceo de esta se colocan los coeficientes estequiométricos en cada componente de la semirreacción.

Cada aluminio pierde  $3e^-$  para que quede el ion aluminio (III) ( $Al^{3+}$ ).

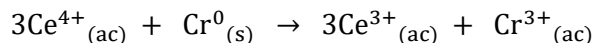
Al sustituir los coeficientes en la reacción (RESPUESTA 1) resulta que:



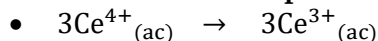
### 8.3.3 Balance de ecuaciones por cambio en el número de oxidación

El balance de ecuaciones químicas por el método del cambio de número de oxidación presupone que, tanto en los reactivos, como en los productos, habrá siempre el mismo número de especies químicas y cargas.

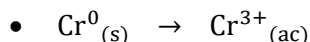
Ejemplo reacción balanceada



➤ Mismo número de **especies químicas**.



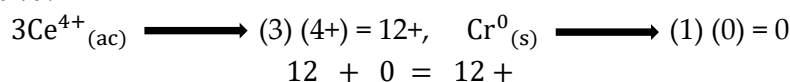
El cerio tiene tres especies en la parte reactiva y tres especies en la parte de productos.



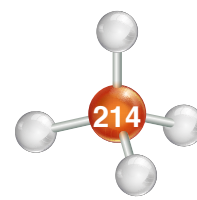
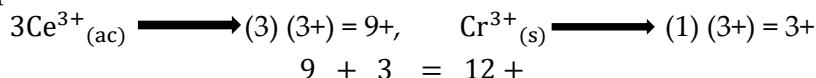
El cromo tiene una especie en la parte reactiva y una especie en la parte de productos.

➤ Mismo número de **cargas**.

• Parte reactiva:



• Parte de productos:





El método por cambio en el número de oxidación consiste en dividir en dos semirreacciones a la reacción oxido-reducción de la reacción global no balanceada. Posteriormente estas dos semirreacciones se balancean por separado y se suman. Así es obtenida la reacción global balanceada.

El proceso para el balanceo por cambio de número de oxidación puede ser resumido en los siguientes pasos:

Paso 1: Identificar, para cada reacción, los números de oxidación de cada especie presente (Tanto en la tabla periódica del apéndice A, como en las tablas de iones comunes se encuentran reportados los números de oxidación de diversas especies químicas).

Paso 2: Identificar, según el cambio del número de oxidación en cuál especie química se lleva a cabo la oxidación y en cuál la reducción. Registrar las semirreacciones de oxidación y reducción.

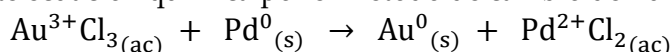
Paso 3: Ajustar ambas semirreacciones para que cada una de ellas involucre el mismo número de electrones.

Paso 4: Colocar los coeficientes estequiométricos encontrados en las semirreacciones en la reacción global y ajustar el total de las cargas en los reactivos y en los productos.

Paso 5: Si en la reacción global se localiza algún componente sin balancear, se debe de ajustar.

**PROBLEMA TIPO:**

Balancear la siguiente ecuación química por el método de cambio de número de oxidación.

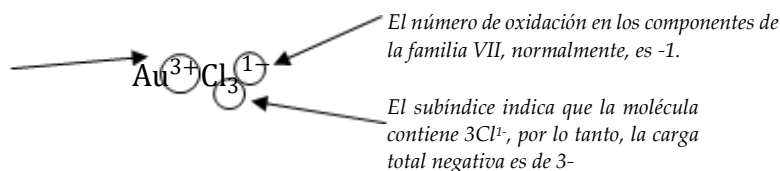


Solución:

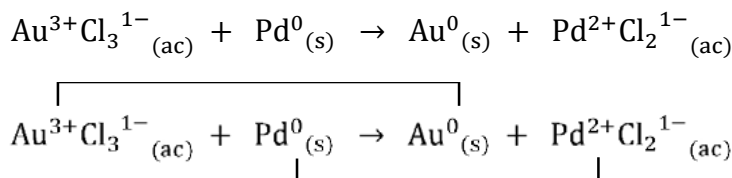
Paso 1: Identificar números de oxidación.

Para realizar este paso se debe analizar cada componente de la reacción. Por ejemplo, el cloro de oro (III) ( $\text{AuCl}_3$ ) es una molécula neutra, pero cada especie debe tener un número de oxidación asociado para que esto suceda.

Para compensar las tres cargas negativas generadas por el  $\text{Cl}^{1-}$ , es necesario que el Au tenga número de oxidación 3+, lo que hace que sea una molécula eléctricamente neutra.



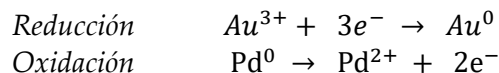
Las sustancias en estado elemental siempre tendrán un número de oxidación igual a cero. Con lo anterior resulta que:



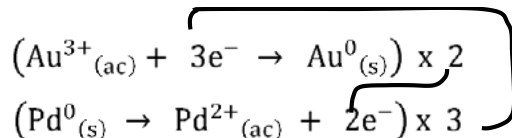
Paso 2: En la siguiente ecuación química, el Oro presenta un cambio en su número de oxidación de 3+ a cero y el Paladio cambia de cero a 2+; la otra especie presente, el Cloro, siempre con 1- como número de oxidación.



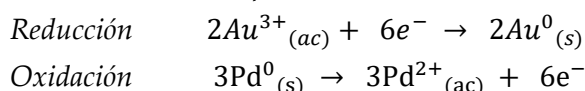
Semirreacciones.



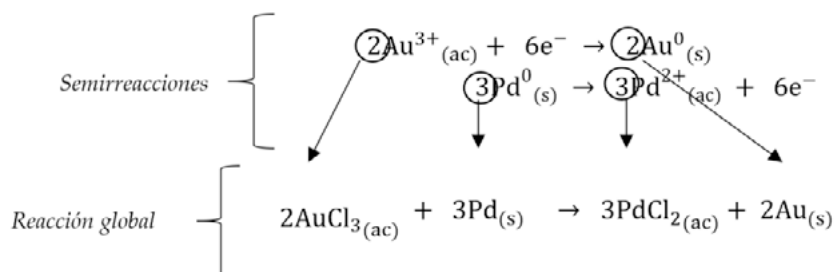
Paso 3: En este tipo de reacción, la oxidación y la reducción deben ocurrir simultáneamente, por lo que es necesario que el número de  $e^-$  que se producen en la oxidación sean los mismos que se consumen.



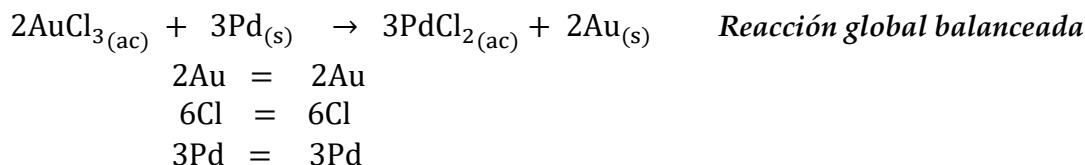
Del ajuste anterior resulta que:



Paso 4: Los coeficientes encontrados en las semirreacciones se colocan en la reacción global según la especie química.



Paso 5: Se verifica que cada especie química se encuentre el mismo número de veces en el lado de los reactivos que en lado de los productos.



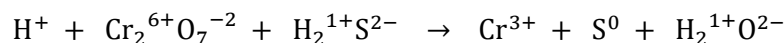
**PROBLEMA TIPO:**

Balancar la siguiente ecuación química por el método de cambio de número de oxidación.



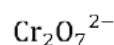
Solución:

Paso 1: Identificar el número de oxidación de cada especie química

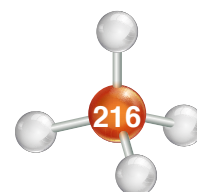


En el caso del compuesto  $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$  (dicromato) la carga total del ion de 2-, por lo que las cargas en las especies involucradas deben sumar 2-.

Para compensar las 14 cargas menos 6e se requieren 12 cargas positivas para que la carga neta sea de 2-. Estas doce cargas positivas deben ser distribuidas entre 2 cromos presentes, por lo que cada cromo debe tener un número de oxidación igual a 6+.

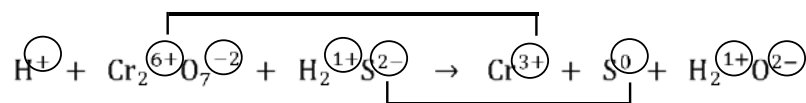


El oxígeno se encuentra con una carga de 2-, pero el ion dicromato contiene siete oxígenos, por lo que se cuenta con 14 cargas menos.

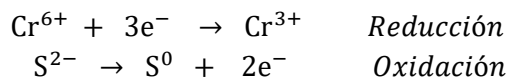




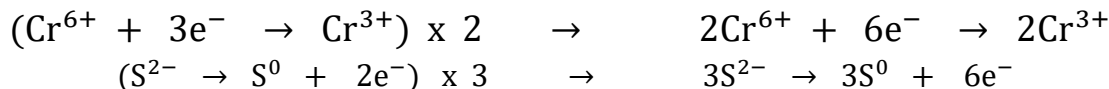
Paso 2: Semirreacciones de oxidación y reducción.



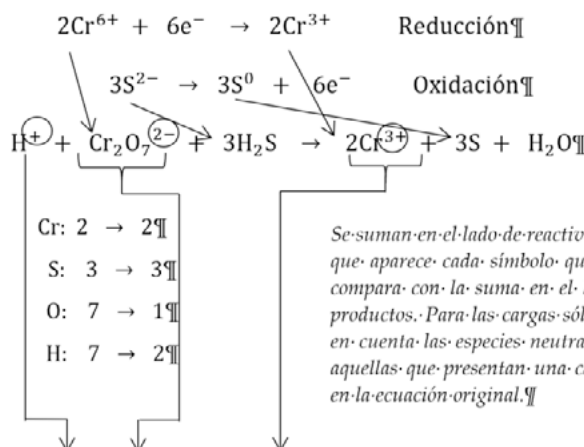
La materia se debe balancear



Paso 3: Mismo número de e en ambas semirreacciones.



Paso 4: Coeficientes en reacción global y ajuste.



Observar que el número de apariciones de O H y la suma de las cargas en reactivos no son iguales, al número de veces que aparecen en los productos, por lo que es necesario de ajustar.

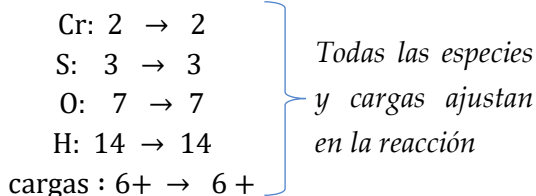
Este planteamiento se resuelve al ajustar las cargas a ambos lados de la reacción. Como existe una deficiencia de cargas (+) en los reactivos y la única especie que genera cargas (+) en este lado de la ecuación es al H<sup>+</sup>, este ion se debe multiplicar por ocho para obtener ocho cargas (+) a las cuales se le restan 2 correspondientes a la carga (2-) del ion compuesto por el dicromato (Cr<sub>2</sub>O<sub>7</sub><sup>2-</sup>), resultando así una carga neta de 6+ para los reactivos, la cual ajusta a lo que hay en los productos.

$$\text{cargas : } (1+) + (2-) = 1- \rightarrow 6+$$

Ajustar el número de veces de aparición de H, colocando un 7 en el H<sub>2</sub>O, del lado de los productos.



Revisar el ajuste de toda la ecuación química.





## 8.4 Pilas voltaicas. Reacción iónica total. Potencial de pila. Diagrama de la pila

### 8.4.1 Pilas voltaicas

#### 8.4.1.1 Predicción de una reacción óxido-reducción

Cuando se llevan a cabo las reacciones de óxido-reducción se desea saber si se van a producir o no, es decir, si son espontáneas o no.

La *espontaneidad de una reacción química*, de forma general, el investigador debe a un evento termodinámico. En concreto, a la *energía libre de Gibbs* entre reactivos y productos (Figura 8.4).

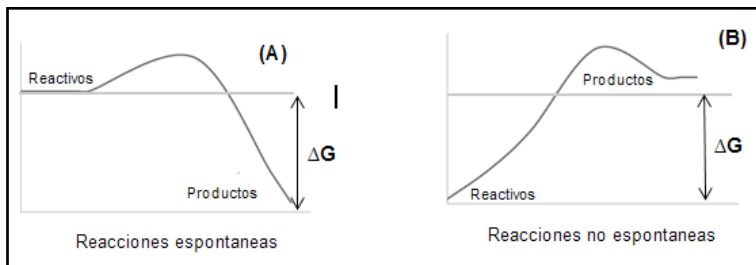


Figura 8.4. Diferencia de energía libre de Gibbs negativa, proceso espontáneo(A), proceso no espontáneo (B), diferencia de energía libre de Gibbs positiva.

Es necesario identificar la dirección espontánea de una reacción química, para conocer los compuestos que se oxidan y los que se reducen.

Dado que en una reacción química existe un punto inicial (reactivos) y un punto final (productos) se puede entender que hay una diferencia de energías entre el punto final y el punto inicial.

La *energía libre de Gibbs (G)* es una propiedad cuyo cambio para un proceso indica si éste es espontáneo o no, además si la energía es disponible para hacer el trabajo.

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

Si existen presión y temperatura constantes, entonces:

$$\Delta G < 0 \text{ proceso espontáneo}$$

$$\Delta G > 0 \text{ proceso no espontáneo}$$

$$\Delta G = 0 \text{ proceso en equilibrio, no hay cambio}$$

Es importante recordar que el potencial de la celda es definido como:

$$E^0_{\text{celda}} = E^0_{\text{(cátodo)}} - E^0_{\text{(ánodo)}}$$

Puesto que la semirreacción de reducción tiene lugar en el cátodo y la de oxidación en el ánodo, entonces se establece la siguiente ecuación.

$$E^0_{\text{reacción}} = E^0_{\text{reducción}} - E^0_{\text{oxidación}} \dots \dots \dots \text{Ec. 8.7}$$

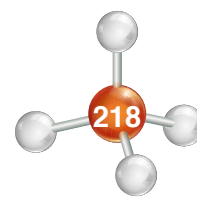
Tanto el potencial estándar de la reacción ( $E^0_{\text{reacción}}$ ) y la energía libre de Gibbs ( $\Delta G$ ) del proceso están relacionados mediante la ecuación de Nernst, la cual será revisada. En ella se observa que el  $E^0_{\text{reacción}}$  es directamente proporcional a la variación de energía libre con signo contrario:

$$E^0_{\text{reacción}} \propto -\Delta G \dots \dots \dots \text{Ec. 8.8}$$

Las pilas voltaicas usan la energía obtenida de una reacción química espontánea. Para estos procesos se entiende de igual manera los conceptos de pila y celda voltaicas.

La energía liberada en una reacción óxido-reducción puede ser utilizada para realizar trabajo eléctrico. Para ello es utilizada una celda voltaica o galvánica, que es un dispositivo constituido por dos partes básicamente.

1. Parte externa del circuito, donde ocurre la movilidad de electrones a través del metal.
2. Parte interna del circuito, donde ocurre la movilidad de los iones en la disolución.







La celda voltaica está conformada por dos semiceldas; la de la izquierda, según el esquema de la Figura 8.5, se establece como el ánodo y la de la derecha como el cátodo. Cada una contiene una disolución distinta, así como los electrodos de dos diferentes metales. Las dos semiceldas están en contacto a través de un puente salino, conectadas a un voltímetro por medio de un material conductor como se observa en la Figura 8.5.

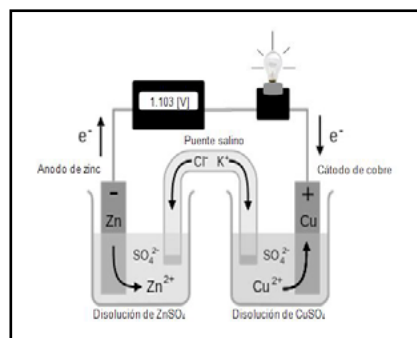
La *pila de Daniell* o *celda de Daniell*, inventada por **John Frederic Daniell (1790-1845)** en 1836, consta de dos electrodos metálicos, donde el ánodo es de Zn y el cátodo de Cu, interconectados por un puente salino de KCl y un conductor externo. Su potencial estándar o fuerza electromotriz es de 1.1 [V] a 25°C. El puente salino puede ser cualquier medio en el cual los iones de las disoluciones pasan con lentitud y está contenido en un tubo de vidrio en forma de U lleno con una disolución salina saturada, con la cual sus iones no reaccionaran con los iones de las disoluciones de las semiceldas, ni con los de los electrodos.

Las tres funciones del puente salino son:

1. Permite el contacto eléctrico entre las dos disoluciones.
2. Evita que se mezclen las disoluciones de los electrodos.
3. Mantiene la neutralidad eléctrica de cada semicelda a medida que los iones entran o salen del puente salino.

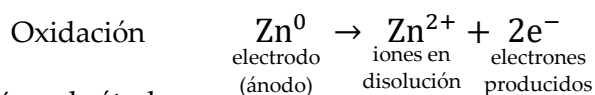
Para que sea mejor aprovechada la energía química de la reacción óxido-reducción en una pila, es necesario que la semirreacción de reducción y la semirreacción de oxidación se lleven a cabo por separado, es decir, separados físicamente. La oxidación del Zn se lleva a cabo en el recipiente de la izquierda y la reducción del Cu en el recipiente de la derecha, según lo que se observa en la Figura 8.5. Conforme al esquema es necesario contar con un medio conductor que transfiera las cargas de una semicelda a otra, aprovechando el paso de los e<sup>-</sup>, para la obtención de energía eléctrica.

Figura 8.5. En la pila voltaica se observa al ánodo de cinc, sumergido en una disolución de ZnSO<sub>4</sub> y un cátodo de cobre sumergido en una disolución de CuSO<sub>4</sub>. Por consiguiente, en el ánodo se lleva a cabo la oxidación de Zn a Zn<sup>2+</sup> y en el cátodo la reducción de Cu<sup>2+</sup> a Cu. El puente salino tiene la función del medio eléctrico conductor entre las dos disoluciones, por medio de la solución de KCl la cual permite el paso de los aniones y cationes de una disolución a otra. Para evitar que la disolución de KCl se mezcle con las otras se usan unos tapones de algodón en los extremos del puente salino.



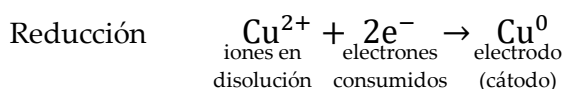
Los electrodos conectados son incapaces de llevar a cabo las reacciones de óxido-reducción, por lo que será necesario sumergirlos dentro de disoluciones que contengan a iones. La condición estándar es llevar a cabo el experimento a 25 [°C], 1 [atm] y emplear disoluciones 1 [M] de concentración.

Así, en el ánodo sucede que:



Conforme se va produciendo Cu metálico, a partir de los iones en disolución, éste se va depositando en el cátodo.

Y en el cátodo:

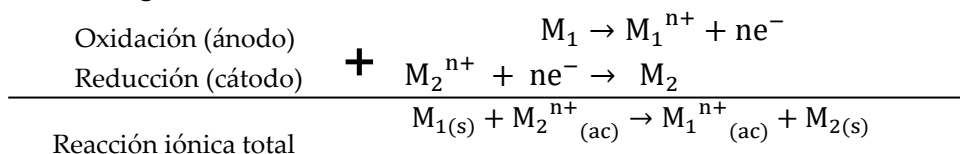


El electrodo de Zn metálico se va desgastando para dar paso a la formación de los iones de Zn<sup>2+</sup> en disolución.



### 8.4.2 Reacción iónica total

Es una **reacción iónica total** la que ocurre en toda la celda y depende de las especies químicas que forman tanto a los electrodos, como a la disolución de cada semicelda. La suma de las semirreacciones de reducción y oxidación produce la reacción iónica total, o también conocida como **reacción global**.



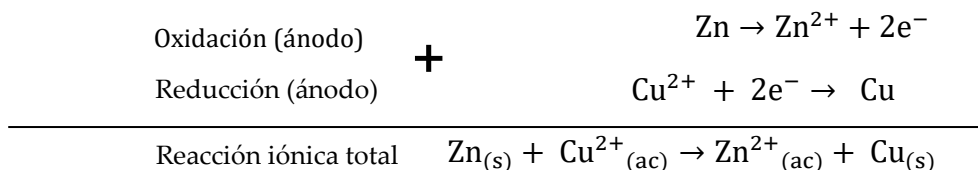
M<sub>1</sub> = Elemento que es agente reductor.

M<sub>2</sub> = Elemento que es agente oxidante.

n = Número de electrones móviles.

M<sub>1</sub> y M<sub>2</sub> son los metales usados para los electrodos, M<sub>1</sub><sup>n+</sup> y M<sub>2</sub><sup>n+</sup> son los iones de los metales empleados, ne<sup>-</sup> es el número de electrones ganados y perdidos en ambas semirreacciones, por lo que en la reacción iónica no se indican. Cuando la celda está en funcionamiento, la masa del electrodo M<sub>1</sub> disminuye y la concentración de M<sub>1</sub><sup>n+</sup> aumenta en la disolución que contiene el ánodo. Sin embargo, en el cátodo sucede lo contrario, los iones en disolución M<sub>2</sub><sup>n+</sup>, al ganar n electrones, generan M<sub>2</sub>, por lo que el cátodo aumenta de masa.

Aplicando esta información en la pila de Daniell (Figura 8.5) se tiene el caso de una celda constituida por dos semiceldas compuestas por una barra de Cu metálico dentro una disolución de sulfato de cobre (II) y otra de Zn metálico dentro de una disolución de sulfato de cinc, por lo que la reacción iónica total es:



En el ánodo de Zn se pierde masa porque parte del Zn metálico se oxida a iones de Zn<sup>2+</sup>, los cuales pasan a la solución. Simultáneamente, en el electrodo de Cu, los iones Cu<sup>2+</sup> se reducen a Cu metálico. Estos iones se depositan sobre el electrodo, por lo cual su masa aumenta (Figura 8.6).

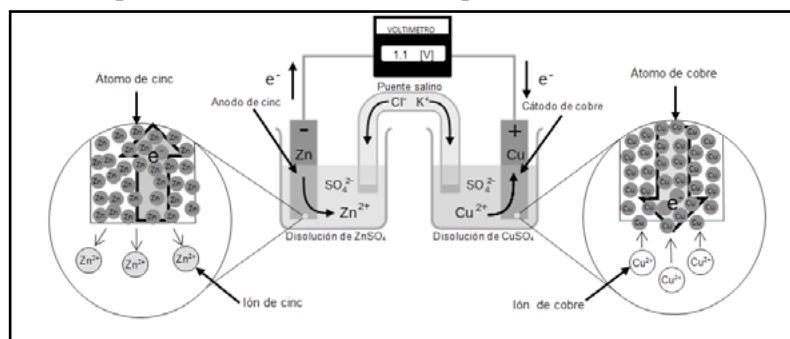


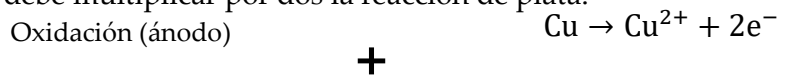
Figura 8.6. En la imagen se muestran las semirreacciones de oxidación y de reducción para los metales cinc y cobre, respectivamente. El círculo de la izquierda representa un acercamiento al ánodo, donde se oxidan los átomos de la barra de Zn, debido a que están cediendo electrones a través del conductor externo, pasando de átomos de Zn a iones de Zn<sup>2+</sup>, en la disolución (ZnSO<sub>4</sub>). Simultáneamente, el recipiente de la derecha contiene una disolución de CuSO<sub>4</sub>. Los iones de Cu<sup>2+</sup>, al tomar los electrones que circulan a través del conductor externo, se depositan como átomos de Cu. en la barra de Cu metálico.



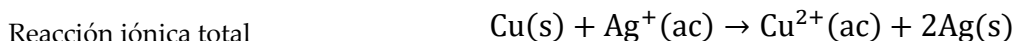
Otra reacción semejante es una celda voltaica, que se compone de una barra de cobre dentro de una solución de  $\text{CuSO}_4$  y una barra de plata dentro de la disolución de  $\text{AgNO}_3$ .

Para esta celda, el ánodo será el electrodo de Cu, ya que el Cu metálico se oxida a iones  $\text{Cu}^{2+}$ . Simultáneamente los iones de  $\text{Ag}^+$  se reducen a Ag metálica, en el electrodo de Ag.

Es necesario tener siempre un equilibrio en la generación y consumo de los  $e^-$  en ambas reacciones; de esta forma, la reducción de la plata se tendrá que llevar dos veces por cada oxidación del cobre ya que éste último genera  $2e^-$  y la plata sólo consume uno. Para que dicho equilibrio se presente, se debe multiplicar por dos la reacción de plata.



+



Lo que sucede en cada semicelda es lo siguiente:

- El Cu metálico se oxida a  $\text{Cu}^{2+}$ , por lo que el ánodo se desgasta conforme la reacción procede.
- El cátodo, constituido por la Ag, va ganando masa, ya que los iones  $\text{Ag}^+$  se van a reducir a Ag metálica que se deposita en la superficie del electrodo de plata.

Para este caso en particular, los iones del puente salino emigran para conservar la electroneutralidad. Parte de los iones  $\text{NO}_3^-$  de la semicelda del cátodo y parte de los iones  $\text{Cu}^{2+}$  de la semicelda del ánodo también migran al puente salino para mantener la carga total en equilibrio. Dos iones  $\text{NO}_3^-$  migran por cada ion de  $\text{Cu}^{2+}$  (Figura 8.7).

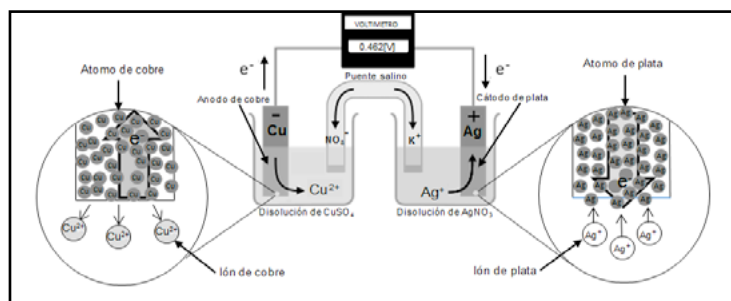


Figura 8.7. En esta imagen no se utiliza KCl como en la figura No 5, porque los iones de  $\text{Cl}^-$  reaccionarían con los iones  $\text{Ag}^+$ , para formar  $\text{AgCl(s)}$  insoluble. A la izquierda se lleva a cabo la oxidación de los átomos de Cu a iones de  $\text{Cu}^{2+}$ , debido a que ceden electrones a través del conductor externo, provocando simultáneamente que los iones de  $\text{Ag}^+$ , al tomar estos electrones, se reduzcan en la superficie barra de Ag metálica a átomos de Ag.

### 8.4.3 Potencial de pila

La diferencia de potencial proporciona la fuerza motriz para mover los electrones a través del circuito externo de una celda. En una pila, la energía potencial de los electrones es mayor en el ánodo que en el cátodo, para que los electrones fluyan espontáneamente del ánodo al cátodo. Es válida una analogía con el flujo de agua de una cascada: a mayor altura, el agua tendrá mayor energía potencial concentrada (Figura 8.8).

En el caso del potencial de la pila, esta diferencia está en proporción de que un

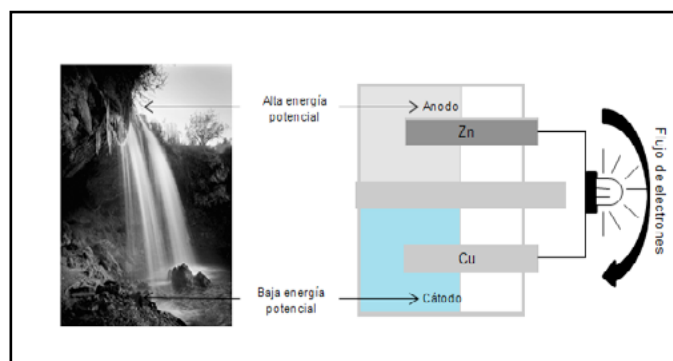
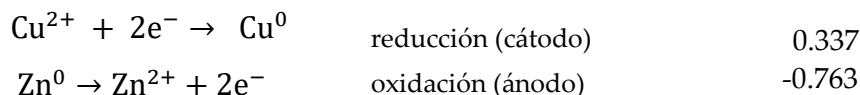


Figura 8.8. Diferencia de energía potencial. El agua fluye espontáneamente debido a la diferencia de energía potencial entre la zona más alta de la cascada y la corriente de abajo. De forma análoga los electrones fluyen del ánodo de la pila voltaica a su cátodo para reducir su energía potencial.



electrodo sea un agente reductor y el otro un agente oxidante, para obtener una diferencia de potencial, que puede ser productiva.

En el caso particular de la pila de Daniell se había encontrado que:  $E^0 [V]$



Para determinar el potencial de la pila o FEM se debe aplicar la ecuación 8.4 que dice:

Sustituyendo: 
$$\begin{aligned} E^0_{\text{celda}} &= E^0_{\text{(cátodo)}} - E^0_{\text{(ánodo)}} \\ E^0_{\text{celda}} &= E^0_{\text{(Cu)}} - E^0_{\text{(Zn)}} \end{aligned}$$

$$E^0_{\text{celda}} = 0.337[V] - (-0.763[V]) = 1.103 [V]$$

La pila de Danielle tiene un potencial de pila a condiciones estándar de 1.103 [V].

El potencial estándar del cinc no cambia de signo, aunque se invirtió la reacción de reducción para que corresponda a una oxidación, ya que la ecuación 8.4 está expresada para potenciales estándar de reducción.

Para obtener pilas con mayor  $E^0_{\text{celda}}$  es necesario utilizar electrodos que tengan  $E^0$  diferentes; es decir, que se encuentren en los extremos de la tabla de potencial estándar (apéndice A), como es el caso del Li y el F (Figura 8.9).

Elemento	Semirreacción de reducción	Potencial estándar de reducción [V]
Li	$\text{Li}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{Li}$	-3.045
K	$\text{K}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{K}$	-2.925
Ca	$\text{Ca}^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Ca}$	-2.870
Na	$\text{Na}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{Na}$	-2.714
Mg	$\text{Mg}^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Mg}$	-2.370
Al	$\text{Al}^{3+} + 3\text{e}^- \rightarrow \text{Al}$	-1.660
Zn	$\text{Zn}^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Zn}$	-0.763
Cr	$\text{Cr}^{3+} + 3\text{e}^- \rightarrow \text{Cr}$	-0.740
Fe	$\text{Fe}^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Fe}$	-0.440
Cd	$\text{Cd}^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Cd}$	-0.403
Ni	$\text{Ni}^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Ni}$	-0.250
Sn	$\text{Sn}^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Sn}$	-0.140
Pb	$\text{Pb}^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Pb}$	-0.126
H <sub>2</sub>	$2\text{H}^+ + 2\text{e}^- \rightarrow \text{H}_2$	0.000
Cu	$\text{Cu}^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Cu}$	+0.337
I <sub>2</sub>	$\text{I}_2 + 2\text{e}^- \rightarrow 2\text{I}^-$	+0.535
Hg	$\text{Hg}^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Hg}$	+0.789
Ag	$\text{Ag}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{Ag}$	+0.799
Br <sub>2</sub>	$\text{Br}_2 + 2\text{e}^- \rightarrow 2\text{Br}^-$	+1.060
Cl <sub>2</sub>	$\text{Cl}_2 + 2\text{e}^- \rightarrow 2\text{Cl}^-$	+1.360
Au	$\text{Au}^{3+} + 3\text{e}^- \rightarrow \text{Au}$	+1.500
F <sub>2</sub>	$\text{F}_2 + 2\text{e}^- \rightarrow 2\text{F}^-$	+2.870

↑ Mejor agente oxidante  
↓ Mejor agente reductor

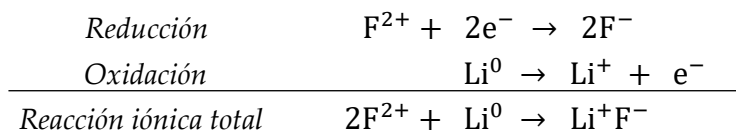
Figura 8.9. Mayor Potencial de celda. En la tabla de potenciales estándar de reducción, los iones de la parte superior son mejores agentes oxidantes. Al contrario, en la parte inferior se encuentran los mejores agentes reductores. En la reacción de uno muy oxidante con otro muy reductor, se obtiene una diferencia de potencial de la pila más grande y se traduce en mayor energía eléctrica.

**PROBLEMA TIPO:**

Construya una pila con electrodos de Litio (Li) y Flúor (F). Obtenga las semirreacciones de oxidación y reducción, así como la reacción iónica total y el potencial de la pila.

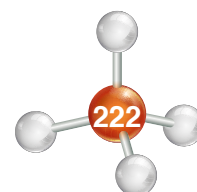
Solución:

En primer lugar, se obtienen las semirreacciones y, posteriormente, se suman para obtener la reacción iónica total.



Una vez obtenida la reacción, se utiliza la ecuación 8.4

$$E^0_{\text{pila}} = E^0_{\text{(cátodo)}} - E^0_{\text{(ánodo)}}$$





Se sustituye el potencial estándar de reducción de cada elemento. Haciendo la suma se obtiene el potencial estándar de la pila:

$$E^0_{\text{pila}} = 2.870[\text{V}] - (-3.045[\text{V}]) = 5.915[\text{V}]$$

La diferencia de potencial por carga eléctrica entre dos electrodos se mide en **unidad de volt**, la cual es una unidad derivada del sistema internacional de unidades. El volt (V) debe entenderse, como la diferencia de potencial necesaria para impartir 1 joule (J) de energía a una carga de 1 coulomb(C).

$$1 \text{ V} = 1 \frac{\text{J}}{\text{C}} \dots\dots\dots \text{Ec. 8.9}$$

Hasta ahora se ha utilizado la ecuación para potencial estándar de celda ( $E^0_{\text{celda}}$ ), para electrodos estándar. Esto es, en condiciones estándar. Para condiciones no estándar, existe una ecuación que describe la relación matemática existente entre FEM de la celda y la concentración de reactivos y productos de una reacción de óxido-reducción. Dicha ecuación es conocida como la **ecuación de Nernst**.

La dependencia de la FEM de celda respecto de la concentración se obtiene a partir de la dependencia del cambio de energía libre de Gibbs respecto de la concentración. El cambio de energía libre de Gibbs,  $\Delta G$ , tiene una relación con el cambio de energía libre estándar,  $\Delta G^0$ , cuando se desea determinarlo a condiciones no estándar.

$$\Delta G = \Delta G^0 + RT \ln Q \dots\dots\dots \text{Ec. 8.10}$$

Donde

$R$ = constante de los gases reales

$T$ = temperatura

$Q$ = cociente de reacción.

En el equilibrio  $Q = Kc$ , donde  $K$  es la constante de equilibrio.

Una pila es un sistema termodinámico que realiza un trabajo eléctrico ( $W$ ) al transportar una carga ( $Q$ ) desde el ánodo, hasta el cátodo por la acción de una diferencia de potencial ( $V$ ).

$$W = q V = q E_{\text{celda}} \dots\dots\dots \text{Ec. 8.11}$$

Donde  $E_{\text{celda}}$  = potencial de la celda en [V].

En la siguiente sección se verá que un Faraday es la carga que tiene un mol de electrones y equivale a aproximadamente a 96485 [C]. El transporte desde el ánodo hasta el cátodo es de  $n$  moles de cargas, por lo que la carga transportada se puede escribir como:

$$q = n F \dots\dots\dots \text{Ec. 8.12}$$

Sustituyendo la carga eléctrica (ecuación 8.12) en el trabajo eléctrico (ecuación 8.11), se obtiene:

$$W = n F E_{\text{celda}} \dots\dots\dots \text{Ec. 8.13}$$

Dado que la energía libre de Gibbs es negativa si el sistema aporta dicha energía, en la pila se espera que el  $\Delta G$  sea negativo por lo que se puede escribir como:

$$-\Delta G = n F E_{\text{celda}} \text{ ó a condiciones estandar } \Delta G^0 = n F E^0_{\text{celda}} \dots\dots\dots \text{Ec. 8.14}$$

Se sustituye  $\Delta G$  ecuación 8.14 en 8.10, se obtiene:

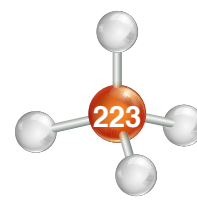
$$-nFE_{\text{celda}} = -nFE^0_{\text{celda}} + RT \ln Q \dots\dots\dots \text{Ec. 8.15}$$

Despejando  $E$  de esta ecuación se obtiene la **ecuación de Nernst**:

$$E_{\text{celda}} = E^0_{\text{celda}} - \frac{RT}{nF} \ln Q$$

Se recomienda a tener la ecuación en términos de logaritmos comunes (base 10):

$$E_{\text{celda}} = E^0_{\text{celda}} - \frac{2.303 RT}{nF} \log Q \dots\dots\dots \text{Ec. 8.16}$$







Y a 298 [K] ó 25 [°C], se tiene que:

$$E_{\text{celda}} = E^0_{\text{celda}} - \frac{0.0592 \text{ [V]}}{n} \log Q \dots \dots \dots \text{Ec. 8.17}$$

$E_{\text{celda}}$  = potencial en condiciones diferentes de las estándar.

$E^0_{\text{celda}}$  = potencial estándar.

$R$  = constante de los gases, 8.314 [J/mol k].

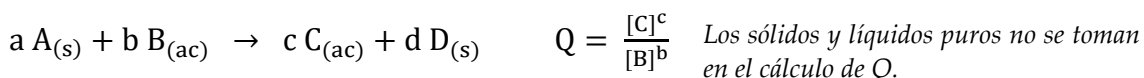
$T$  = Temperatura absoluta en K.

$n$  = moles de electrones que se transfieren en la reacción o semirreacción.

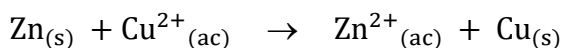
$F$  = Faraday, 96485 [C].

$Q$  = cociente de reacción  $\frac{[\text{Red}]}{[\text{Ox}]}$

Recordatorio de equilibrio químico:



En este ejercicio se ve la aplicación de la ecuación de Nernst para determinar el potencial de celda, en condiciones no estándar. Si la concentración para  $\text{Cu}^{2+}$  es 5.0 [M] y  $\text{Zn}^{2+}$  es de 0.050 [M]. Donde la reacción global está dada por:



Se transfieren dos electrones del Zn al  $\text{Cu}^{2+}$ , por lo que  $n=2$ , la fem estándar ( $E^0_{\text{celda}}$ ) es de +1.10 [V] y para este caso se usará una temperatura de 25 [°C] (298 [K]).

Sustituyendo lo anterior en la ecuación 7.17, se tiene que:

$$E_{\text{celda}} = 1.10 \text{ V} - \frac{0.0592 \text{ V}}{2} \log \frac{[\text{Zn}^{2+}]}{[\text{Cu}^{2+}]}$$

En este caso si  $[\text{Cu}^{2+}]$  es 5.0 [M] y  $[\text{Zn}^{2+}]$  es de 0.050 [M]

$$E_{\text{celda}} = 1.10 \text{ V} - \frac{0.0592 \text{ V}}{2} \log \frac{[0.050]}{[5.0]}$$

Finalmente se obtiene el siguiente resultado

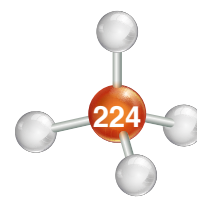
$$E_{\text{celda}} = 1.10 \text{ V} - \frac{0.0592 \text{ V}}{2} (-2.00) = 1.16 \text{ [V]}$$

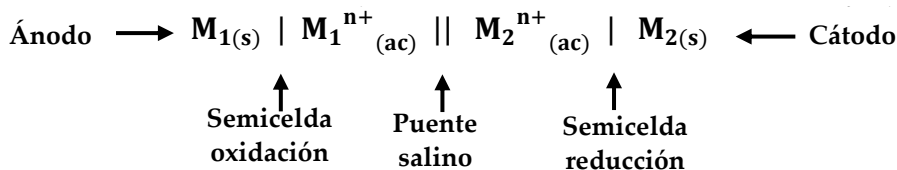
### 8.4.4 Diagrama de la pila

Un **diagrama de la pila** muestra los componentes de una celda electroquímica de modo simbólico, para este caso en particular una pila voltaica. Según el convenio de IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) la pila es representada en un diagrama de la siguiente manera:

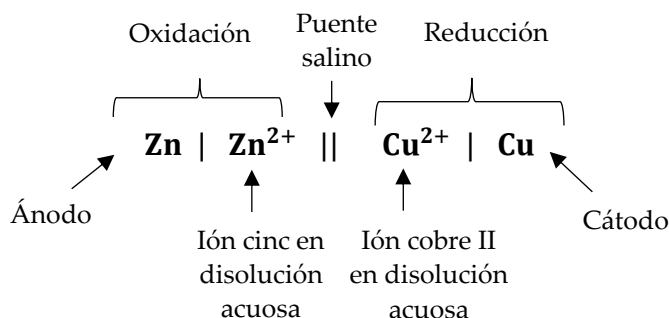
- 1) El ánodo estará situado de lado izquierdo del diagrama.
- 2) El cátodo estará situado de lado derecho del diagrama.
- 3) Con una línea vertical (|), se representa el límite entre dos fases que podrían ser un electrodo metálico y una disolución. Las especies solubles se colocan en la región media del diagrama.
- 4) Con doble línea vertical (||), se representa la unión entre los compartimentos de dos semiceldas, generalmente un puente salino.

El diagrama de la pila para una celda está compuesto por dos semiceldas y unidas por un puente salino. En una semicelda, hay un metal en estado sólido ( $\text{M}_{(s)}$ ), así como iones del mismo metal ( $\text{M}^{n+}_{(ac)}$ ) en la disolución acuosa y en la otra, átomos e iones en la disolución acuosa de un metal diferente a la primera semicelda, representadas de la siguiente manera:





El diagrama de la pila, para el caso de la pila de Daniell, es el siguiente:



**PROBLEMA TIPO:**

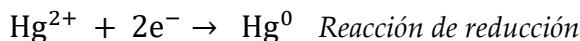
A partir de este diagrama de pila, determinar:



- La reacción de reducción.
- La reacción de oxidación.
- La FEM.
- La reacción iónica total.

*Solución:*

1. Para obtener la reacción de reducción, se observa que el ión  $\text{Hg}^{2+}$  está ganando dos electrones. Esta acción describe la reducción en la semicelda.



2. Para obtener la reacción de oxidación, se observa que el átomo  $\text{Ag}$  está perdiendo un electrón. Esta acción describe la oxidación en la semicelda.



3. Se tiene la ecuación 8.4:

$$E^0_{\text{celda}} = E^0_{(\text{cátodo})} - E^0_{(\text{ánodo})}$$

Se sustituye el potencial estándar de  $\text{Hg}$  por el potencial estándar del cátodo y el potencial estándar de  $\text{Ag}$  por el potencial estándar del ánodo:

$$E^0_{\text{celda}} = E^0_{(\text{Hg})} - E^0_{(\text{Ag})}$$

Por último, se sustituye el valor del potencial estándar tanto del  $\text{Hg}$ , como de la  $\text{Ag}$  y se obtiene el potencial estándar de toda la celda.

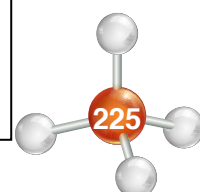
$$E^0_{\text{celda}} = 0.854[\text{V}] - (0.800[\text{V}]) = \mathbf{0.054[\text{V}]}$$

4. Se conocen las reacciones de reducción y oxidación, se reescribe de forma que queden los reactivos del lado izquierdo de la flecha y los productos del lado derecho.



**PROBLEMA TIPO**

En el campo Akal se produce crudo con alto contenido de ácido sulfhídrico ( $\text{H}_2\text{S}$ ). La mayoría de los pozos productores trabajan por el espacio anular y existe preocupación de una probable presencia de corrosión y posterior invasión de la formación al pozo. Esto ocurre porque la T.R. está constituida de hierro ( $\text{Fe}$ ) y debido a que son pozos poco profundos. Sus condiciones son estándar.





**Espacio anular:** es el espacio que rodea a la tubería de producción, la cual se encuentra dentro de la tubería de revestimiento; de otra manera: es el espacio que existe entre la tubería de producción y la tubería de revestimiento.

**Invasión de la formación:** esto ocurre debido a puntos débiles en la T.R., como puede ser tensión o la misma corrosión, provocando posteriormente su colapso, debido a gradientes de presión altos en la formación.

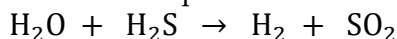
**T.R. (tubería de revestimiento):** tubería cementada en su lugar, durante el proceso de construcción del pozo, para darle estabilidad.

a) Escribe la reacción de la celda voltaica, provocada por la presencia del H<sub>2</sub>S en el espacio anular.

b) Determina si el Aluminio (Al) sería mejor que el Hierro (Fe), para combatir el deterioro de la T.R. debido a la presencia del H<sub>2</sub>S, que se produce conjunto al crudo.

**Estrategia:**

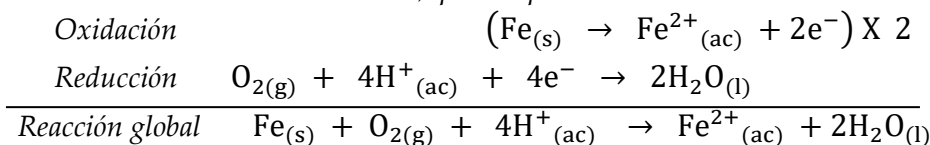
Se analiza qué función tiene el H<sub>2</sub>S en el medio. Se sabe que es un gas producido en conjunto del crudo, el cual, a su vez, tiene contacto con el agua de formación y esta reacción forma un medio ácido que facilitará la reacción electroquímica entre el Fe y el O<sub>2</sub> presente en el medio.



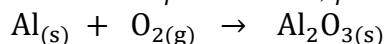
Por la presencia de agua el SO<sub>2</sub>, pasará a SO<sub>3</sub> y después a H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, que formará el medio ácido. Primero se escribe la reacción donde el Fe se oxida y sus electrones cedidos reducen el oxígeno a agua en el cátodo, que a su vez es otra región de la misma superficie de la tubería. Por último, vamos a la serie de actividad para comparar con el aluminio. Y verificar que esté en algún lugar posterior al del Fe, es decir, que sea más activo químicamente y retarde esta reacción.

*Solución:*

a) Se determina tanto la reacción de oxidación, como la de reducción. Debemos, recordar que se produce el mismo número de e<sup>-</sup> en la oxidación, que los que se consumen en reducción.



b) El metal posterior a la serie de actividad es el Cr. Se debe tomar un metal que sea más activo químicamente. Para esta situación una buena elección es el Al ya que, en contacto con el O<sub>2</sub>, éste reacciona formando Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> que sirve como una capa inhibidora, para combatir el deterioro de la T.R.



## 8.5 Celdas electrolíticas: Leyes de Faraday. Galvanización. Electrodeposición

### 8.5.1 Celdas electrolíticas: Leyes de Faraday

La electrólisis es un proceso en el que es utilizada una fuente externa de energía eléctrica para inducir una reacción química no espontánea. Las celdas electroquímicas donde ocurre la electrólisis son llamadas *celdas electrolíticas*.

Una celda electrolítica consta de un recipiente donde se encuentra el electrolito, con electrodos sumergidos en él y conectados a una fuente de corriente directa (Figura 8.10). El electrolito es una disolución que en su composición contiene iones libres. Esta cualidad permite que sea un conductor eléctrico.

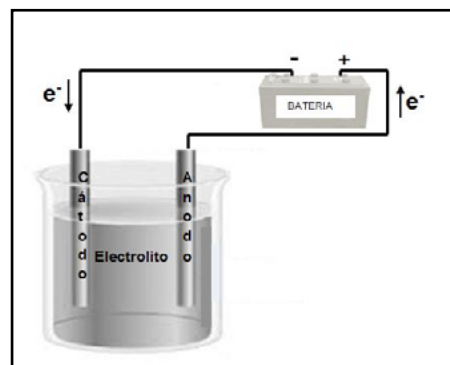


Figura 8.10. Celda electrolítica.



Faraday descubrió que algunas sustancias diluidas con agua conducían energía eléctrica y notó que algunos compuestos se separaban en sus elementos cuando esta energía pasaba a través de ellos. Los átomos de algunos elementos son atraídos al electrodo positivo y los demás hacia el electrodo negativo. De esta manera llegó a la conclusión de que estos átomos estaban eléctricamente cargados y los llamó *iones*.

A partir de este trabajo, desarrolló el tratamiento cuantitativo de la electrólisis. Faraday observó que la cantidad de sustancia del producto formado o lo que se había consumido de la parte del reactivo en un electrodo, era proporcional a la cantidad de electricidad transferida al electrodo y a su masa molar de la sustancia utilizada.

Tras sus experimentos, este científico estableció las reglas fundamentales del comportamiento en la electrólisis:

### 8.5.1.1 Primera Ley de Faraday

La cantidad de sustancia que experimenta oxidación o reducción en cada electrodo durante la electrólisis es directamente proporcional a la cantidad de electricidad (Q) que pasa a través de una celda, donde Q es el producto de la corriente (I) y el tiempo (t).

$$Q = I t \dots\dots\dots \text{Ec. 8.18}$$

De esta manera es como recibe el nombre de Faraday esta unidad cuantitativa: cantidad de electricidad que corresponde a la ganancia o pérdida y, por lo tanto, al paso de  $6.022 \times 10^{23}$  electrones o una mol de electrones.

$$1 [F] = 6.022 \times 10^{23} e^- = 96485 [C]$$

### 8.5.1.2 Segunda Ley de Faraday

El paso de una determinada cantidad de electricidad produce dos sustancias diferentes con cantidades en función del número de electrones que se ganan o pierden con respecto al elemento en estado elemental.

$$n_i = \frac{Q}{n_{e^-} F} = \frac{I t}{n_{e^-} F} \dots\dots\dots \text{Ec. 8.19}$$

Donde:  $n_i$  = moles de la sustancia i [mol].

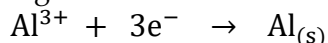
Q = carga correspondiente a la cantidad de electricidad que pasa por la celda [C].

$n_{e^-}$  = número de electrones ganados o perdidos por la sustancia.

F = carga generada por un mol de  $e^- = 96485 [C]$

#### PROBLEMA TIPO:

Se hace pasar una corriente fija de 2.0 [A] por un periodo de 30[min]. Calcule el número de moles producidos de  $Al_{(s)}$  según la siguiente semirreacción:



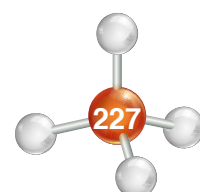
Solución:

$$n_{Al} = \frac{I t}{n_{e^-} F}$$

$$n_{Al} = \frac{(2.0[A])(1800[s])}{(3)(96485[C])}$$

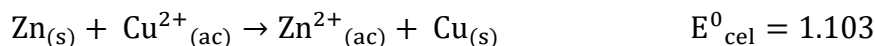
$$n_{Al} = 0.0124 [mol] \text{ de } Al.$$

Analizando las celdas electroquímicas, se observa que, en una celda voltaica o galvánica, debido a la transformación de energía de un cambio químico, se obtiene energía eléctrica de manera espontánea.

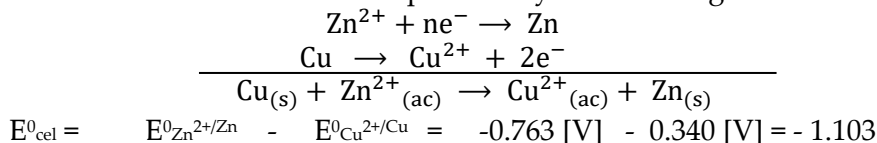




En el análisis de los dos tipos de celdas electroquímicas, en el caso de una que contenga electrodos de cinc y cobre respectivamente, cuando opera espontáneamente, los electrones fluyen del cinc al cobre, es decir de ánodo al cátodo.



Si esta misma celda se conecta a una fuente de electricidad externa con un voltaje superior a 1.103 [V], como se muestra en la Figura 8.11, esta conexión forzará a los electrones a entrar en el electrodo de cinc, ahora cátodo y a salir del electrodo de cobre, ahora ánodo. En este caso la reacción de la celda es inversa a la reacción espontánea y el  $E^0_{\text{cel}}$  es negativo.



Si se tiene una celda voltaica e invertimos el sentido del flujo de electrones se transforma en una celda electrolítica (Figura 8.11).

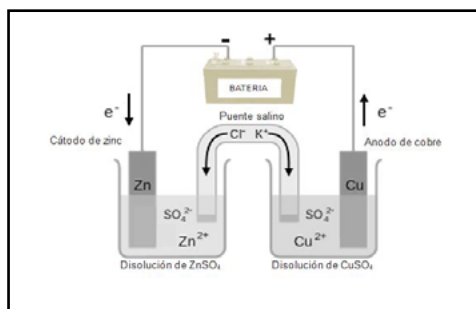
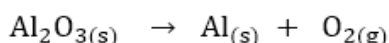


Figura 8.11. Celda electrolítica. La celda electroquímica, se había presentado en el tema de celdas voltaicas, si se conecta una batería de corriente directa, donde se tenía el interruptor y aplicamos un voltaje mayor al  $E^0_{\text{celda}}$ , de la reacción espontánea, se cambia el sentido del flujo de electrones de la reacción espontánea citada. De esta forma cambio de una celda voltaica a una celda electrolítica.

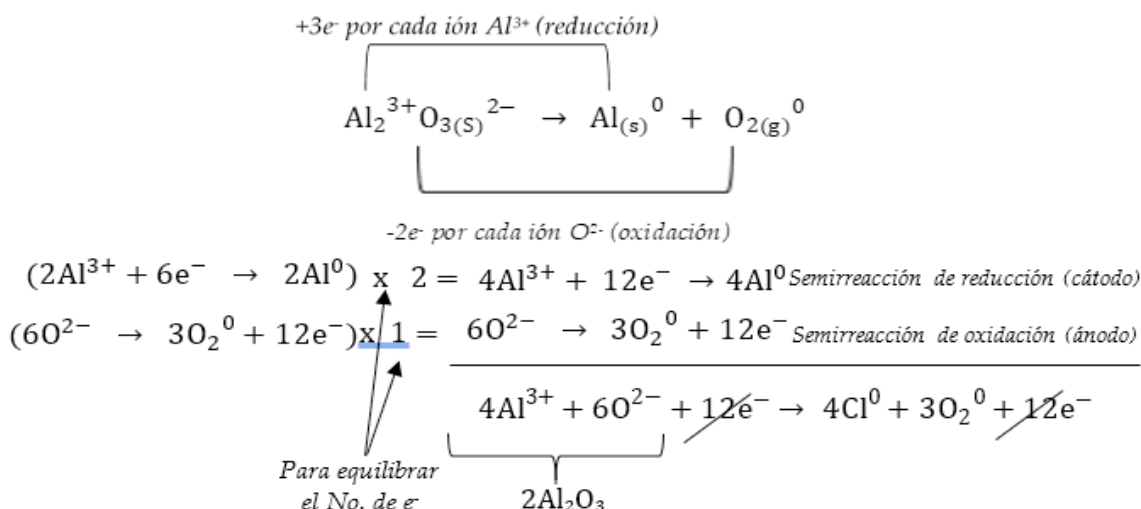
**PROBLEMA TIPO:**

El 83 % de la corteza terrestre está constituida por aluminio (Al), el cual se obtiene de forma pura a partir de la alúmina ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), también conocida como óxido de aluminio, según la siguiente reacción química.



Determine el tiempo [h] necesario para obtener 1 [kg] de  $\text{Al}_{(s)}$  al tener  $3.73 \times 10^2$  [A] de corriente.

Solución: Primero se balancea la ecuación a la vez que se establecen las reacciones que determinan los [moles de  $e^-$ ] involucrados por cada mol de Al y  $\text{O}_2$  obtenidos.







En la semirreacción de reducción se observa que cuatro iones de  $Al^{3+}$  reaccionan con  $12e^-$  para producir cuatro átomos de aluminio metálico (Al), por lo que:

$$1[\text{kg}]Al \left( \frac{1000[\text{g}]}{1[\text{kg}]} \right) \underbrace{\left( \frac{1[\text{mol}]}{26.98[\text{g}]} \right)}_{\text{Masa atómica del Al}} \underbrace{\left( \frac{12[\text{mol}]e^-}{4[\text{mol}]Al} \right)}_{\text{Relación estequiométrica entre } e^- \text{ y } Al^0} = 111.19[\text{mol}]$$

Aplicando las leyes de Faraday, se tiene que:

$$111.19 [\text{mol}]e^- \underbrace{\left( \frac{96500[\text{C}]}{1[\text{mol}]e^-} \right)}_{\text{Faraday [F]}} = \underbrace{10,730,170.5 [\text{C}]}_Q$$

$$Q = It \therefore t = \frac{Q}{I} = \frac{10,730,170.5 [\text{C}]}{3.73 \times 10^2 [\text{A}]} = 28767.21 [\text{s}] \left( \frac{1[\text{h}]}{3600[\text{s}]} \right) \cong 8[\text{h}]$$

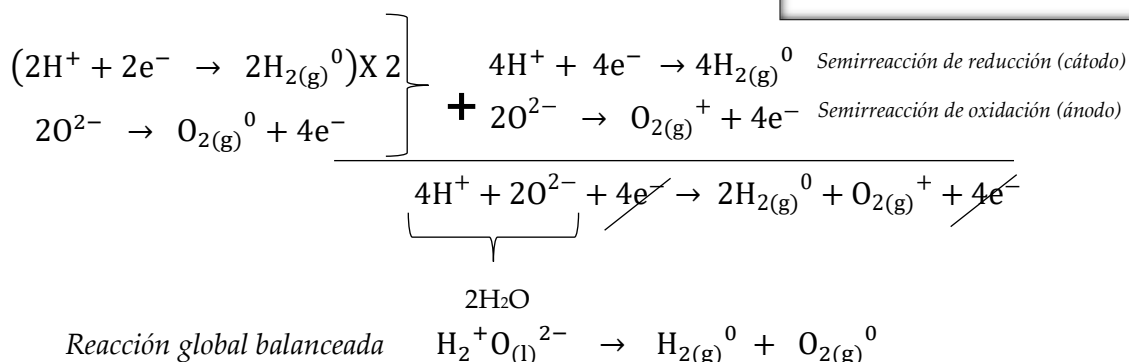
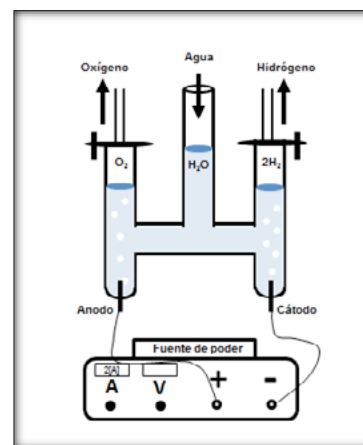
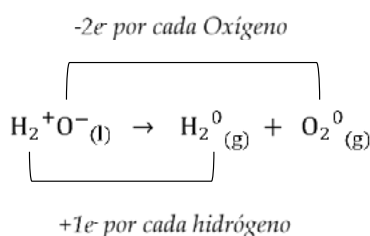
Obtener 1[kg] de Al metálico usando  $3.73 \times 10^2$  [A], se llevará un tiempo aproximado de 8[h].

### PROBLEMA TIPO:

El agua puede ser descompuesta en sus elementos gaseosos ( $H_2$  y  $O_2$ ) por medio de un proceso de electrólisis. El dispositivo comúnmente usado como celda electrolítica es conocido como aparato de Hoffman, el cual tiene la calidad de tener compartimientos separados para recolectar los gases generados y medir su volumen. También es necesario agregar al agua alguna sal que permita tener transporte de electricidad a través de ella.

Prediga la cantidad (litros) de  $H_{2(g)}$  y  $O_{2(g)}$  que se obtendrán a partir de la electrólisis del agua, si se le hace pasar una corriente de 2 [A], por un lapso de 90 [min] a 25 [°C] y 0.76 [atm].

Solución:





Cantidad de carga involucrada en el proceso:

$$Q = I t \quad Q = (2[A]) \left( (90[\text{min}]) \left( \frac{60[\text{s}]}{1[\text{min}]} \right) \right) = 10,800.00 [\text{C}]$$

Moles de  $e^-$  involucrados en el proceso

$$10800[\text{C}] \left( \frac{1[\text{mol}]e^-}{96500[\text{C}]} \right) = 11.19 \times 10^{-2} [\text{mol}]e^-$$

Volumen generado de  $\text{H}_2(\text{g})$  y  $\text{O}_2(\text{g})$  Faraday

$$\text{Para } \text{H}_2(\text{g}) \quad 11.19 \times 10^{-2} [\text{mol}]e^- \left( \frac{2[\text{mol}]\text{H}_2}{4[\text{mol}]e^-} \right) = 55.95 \times 10^{-3} [\text{mol}]\text{H}_2 = n_{\text{H}_2}$$

Como se trata de gases, se puede emplear la ecuación de los gases ideales  $PV = nRT$

$P = \text{presión}[\text{atm}]; V = \text{volumen}[\text{l}]; n = \text{moles}[\text{mol}]; T = \text{temperatura} [\text{K}]$

$R = \text{constante de los gases} = 0.082 \left[ \frac{\text{atm l}}{\text{mol K}} \right]$

Usando la ecuación de los gases ideales

$$V_{\text{H}_2} = \frac{n_{\text{H}_2} R T}{P} = \frac{(55.95 \times 10^{-3} [\text{mol}]) \left( 0.082 \left[ \frac{\text{atm l}}{\text{mol K}} \right] \right) (25 + 273.15 [\text{K}])}{0.76 [\text{atm}]}$$

$$\cong 1.8 [\text{l}] \text{ de } \text{H}_2 \text{ gaseoso}$$

$$\text{Para } \text{O}_2(\text{g}) \quad 11.19 \times 10^{-2} [\text{mol}]e^- \left( \frac{1[\text{mol}]\text{O}_2}{4[\text{mol}]e^-} \right) = 27.98 \times 10^{-3} [\text{mol}]\text{O}_2 = n_{\text{O}_2}$$

$$V_{\text{O}_2} = \frac{n_{\text{O}_2} R T}{P} = \frac{(27.98 \times 10^{-3} [\text{mol}]) \left( 0.082 \left[ \frac{\text{atm l}}{\text{mol K}} \right] \right) (298.15 [\text{K}])}{0.76 [\text{atm}]}$$

$$\cong 0.9 [\text{l}] \text{ de } \text{O}_2 \text{ gaseoso}$$

En la electrólisis del  $\text{H}_2\text{O}$  siempre se obtendrá el doble de la cantidad de  $\text{H}_2$  con respecto al  $\text{O}_2$ , debido a la estequiometría de la reacción.

### 8.5.2 Galvanización

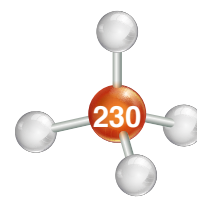


Figura 8.12. Galvanización por inmersión caliente. Este tipo de galvanización es altamente protector, anticorrosivo y muy recomendable para tuberías de aceros al carbono no aleados, aceros de baja aleación, aceros de fácil maquinado que contengan azufre.

La **galvanización** es una aplicación de la electrólisis que consiste en la producción de una película de un metal sobre otro de menor actividad química. Para ello es necesario un depósito de partículas finas, de gran tenacidad, adherencia y de fácil pulimiento.

Este revestimiento puede ser aplicado como efecto decorativo o empleado para dar protección al metal, aumentando la resistencia a la corrosión. En el caso de la industria petrolera, como siempre se construyen instalaciones para la extracción, recolección, separación, procesamiento, almacenamiento, medición y transporte de hidrocarburos, es perentorio utilizar procesos de galvanización, tanto en el diseño, como en la construcción de la tubería y de otras instalaciones metálicas (Figura 8.12).

Una gran ventaja con el uso de la galvanización radica en que permite el empleo de metales de menor costo





los cuales cubiertos con una o varias capas de otro metal, mejoran su aspecto exterior y aumentan su resistencia al deterioro.

El metal que constituye la película se disuelve del ánodo del material sumergido en un electrolito que contenga iones de metal, los cuales son depositados sobre el metal que va a ser recubierto (cátodo).

### 8.5.3 Electrodeposición

La **electrodeposición** consiste en la producción o reproducción de artículos por depósito electrolítico. Este proceso ocurre en una celda electrolítica, en la cual los iones metálicos que se encuentran en el electrolito son depositados para formar una o varias capas en el cátodo del metal con el que se trabaja.

Por medio de la electrólisis se pueden producir algunos elementos, tales como aluminio, magnesio, sodio, cloro, hidrógeno y oxígeno. El cobre producido mediante este método es de alta pureza. El proceso consiste en tomar una parte de cobre con impurezas, como ánodo, y una lámina delgada de cobre puro, como cátodo. Durante el proceso, el  $\text{Cu}^{2+}$  producido por la oxidación que ocurre en el ánodo se desplaza a través de una disolución formada de ácido sulfúrico y sulfato de cobre (II) hasta el cátodo, donde hay reducción del  $\text{Cu}^{2+}$  a  $\text{Cu(s)}$ . El catado de cobre puro aumenta su tamaño, mientras que el ánodo de cobre con impurezas se va reduciendo (Figura 8.13).

La **electrotipia** es un proceso perteneciente a la electrodeposición. Consiste en la reproducción de composiciones tipográficas, grabados y medallas, así como en elaboración de tubos por depósito electrolítico. La producción implica la utilización de un molde del objeto que desea reproducirse, generalmente confeccionado con un metal blando o con cera.

Para que el molde no sea conductor, debe aplicarse una capa de grafito, la cual prodiga conductibilidad en el proceso electrolítico. Algunas veces son utilizados moldes de plomo grafitados (Figura 8.14), sin embargo, es más recomendable utilizar una solución de cromato diluido para producir cromato de plomo, el cual facilita la separación posterior. Una vez terminado el molde, se rellena con un metal de bajo punto de fusión como plomo y estaño, para dar rigidez y resistencia a la reproducción.

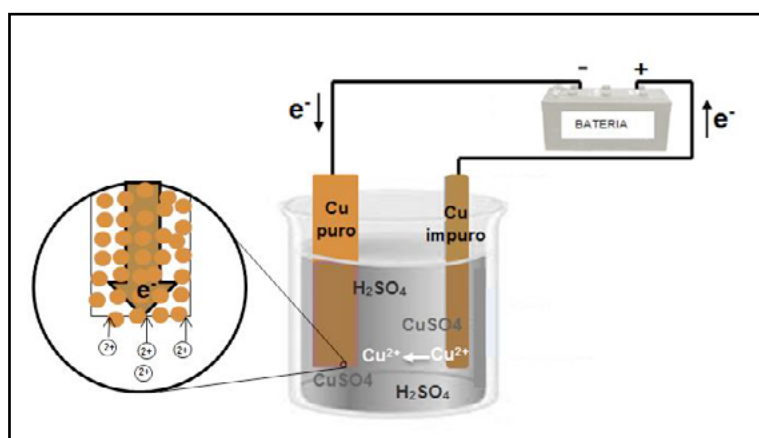


Figura 8.13. Celda electrolítica para producir cobre puro. En esta imagen se observa cómo la lámina delgada de cobre puro actúa como agente reductor, debido a que el  $\text{Cu}^{2+}$  cedido en el ánodo, ha sido depositado en el cátodo.

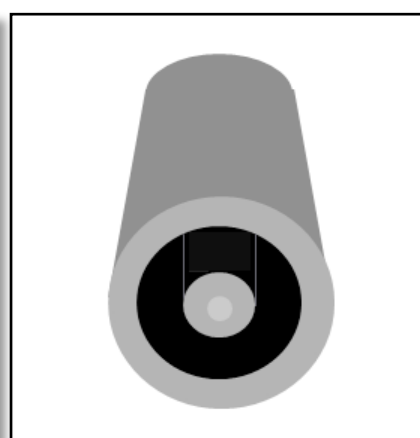


Figura 8.14. Molde de plomo grafitado para tubos por depósito electrolítico.

**PROBLEMA TIPO:**

En el nuevo proyecto de las minas de Cananea, se extrae manganeso y cromo; sin embargo, antes se procesa una mena constituida por arcillas,  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  y  $\text{Mn}_3\text{O}_4$ . En la producción de estos metales se aplica el método de reducción química y se utiliza aluminio (Al). Debido a un mal cálculo se produjo mayor cantidad de metal y es necesario regresar el aluminio a su estado puro, ya será requerido para otros procesos.

- Obtener las reacciones de la reducción química del  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  y  $\text{Mn}_3\text{O}_4$  con el aluminio.
- Determinar qué voltaje se necesita para regresar el aluminio a su estado puro a partir del óxido de aluminio ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), por medio de electrólisis y utilizando cromo (Cr).

**Estrategia**

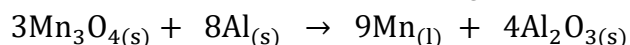
Los minerales involucrados son óxidos y pueden ser utilizados en la reducción química para obtener el metal puro de la mena, con metales muy electropositivos, como sodio, magnesio y aluminio. Al entrar en contacto con el oxígeno, forma óxido de aluminio ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), una capa delgada en la superficie del aluminio que estaba en su estado puro, lo que lo hace un buen candidato como agente oxidante.

Para conocer el voltaje requerido para el proceso no espontáneo, se calcula el potencial de la celda entre el  $\text{Al}_2\text{O}_3$  y Cr. El voltaje inducido tiene que ser mayor al obtenido negativamente, de la reacción del inciso anterior.

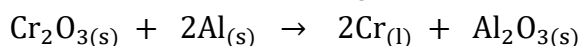
*Solución:*

a) Ahora se verifica que el Aluminio es un buen agente oxidante, para este tipo de minerales.

Para el caso del Manganeso (Mn) la reacción balanceada es la siguiente:

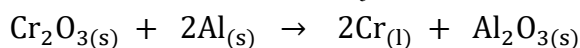


En el caso del Cromo (Cr), la reacción balanceada es la siguiente:

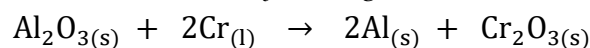


b)

Del inciso anterior ya se tiene la reacción total del  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  y Al.



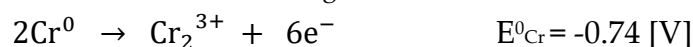
Ahora se tiene que realizar una reacción inversa y es la siguiente:



De la reacción total se obtienen las semirreacciones de oxidación y reducción. La semirreacción de oxidación es la siguiente:



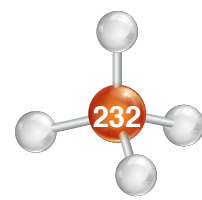
Y para la semirreacción de reducción se tiene la siguiente:



Una vez conocidos los potenciales estándar de reducción de cada semicelda se obtiene el potencial estándar de celda (Apéndice A).

$$E_{\text{celda}}^0 = -1.66 \text{ [V]} - (-0.74) \text{ [V]} = -0.92 \text{ [V]}$$

El Voltaje necesario para llevar a cabo el proceso electrolítico y el aluminio a su estado puro, es de **0.92 [V]**.





## 8.6 Corrosión. Inhibidores. Protección catódica

### 8.6.1 Corrosión

La corrosión es un deterioro físico que implica cambio químico. Ocurre en algunos metales debido al ataque del oxígeno presente en su ambiente. Este proceso es destructivo y representa una gran pérdida económica, por lo que es importante tomar medidas de prevención y de control.

Es referido a los metales, porque son más susceptibles, debido a que tienen electrones libres y poseen celdas electroquímicas dentro de su estructura. Las principales causas de este evento son el agua y la atmosfera, aunque también puede ocasionarlo una solución química, e incluso, un metal líquido.

El lugar donde ocurre mayor corrosión es la parte donde el metal es más activo y se encuentra en los puntos de tensión. En el caso de una tubería de acero, que en su mayoría está hecha de hierro, primero se corroen sus extremos. En un objeto de acero, su punto de tensión actúa como ánodo, donde el hierro se oxida a hierro (II) y se forman huecos (Figura 8.15).

La velocidad de la reacción química en la cual ocurre la corrosión depende de varios factores, principalmente la temperatura y la concentración de reactivos, además del esfuerzo mecánico y la erosión.

La corrosión uniforme de una superficie metálica expuesta a un ambiente nocivo se puede cuantificarse de varias formas. La velocidad de la corrosión se expresa como una pérdida de peso por área de superficie expuesta, por unidad de tiempo.

En instalaciones para la industria petrolera ocurren diversos tipos de corrosión. Las siguientes son las más comunes:

- **Corrosión por puntos:** Es el tipo más común en metales como el acero. Deteriora grandes áreas en tuberías u otras partes metálicas.
- **Corrosión uniforme:** La superficie del metal es corroída en la misma proporción, reduciendo el espesor del metal en una cantidad uniforme.
- **Corrosión de hidrógeno:** Es la formación de moléculas de hidrógeno dentro del metal: existe agrietamiento provocado por el  $H_2S$  (ácido sulfhídrico) presente en la perforación y por los fluidos de terminación en pozos petroleros. Estas sustancias provocaran que el metal esté debajo de su esfuerzo de fatiga.
- **Corrosión por fatiga:** El esfuerzo cíclico por la rotación de la tubería de perforación, reducirá su vida útil en campo.

Los medios corrosivos principales en capas de aceite son el oxígeno, el dióxido de carbono y ácido sulfhídrico, contenidos dentro del fluido de perforación su presencia causará o acelerará el proceso de corrosión.

El oxígeno es el principal agente corrosivo. Cuando está presente en el fluido de perforación, actúa como un medio iónico si se encuentra en contacto con el metal. El oxígeno entra al fluido de perforación cuando se realizan operaciones de superficie: renovación de sólidos por equipo mecánico, operaciones al mezclar agua, etc.



Figura 8.15. Corrosión de tubería de acero, ocasionada por el ambiente húmedo en el que fue instalada.





Cuando el dióxido de carbono se mezcla con el fluido de perforación, forma un ion ácido; como consecuencia, disminuye el pH del fluido y favorece la corrosión.

Las sales alcalinas como lo son el (NaOH y el KCl) se hidratan para formar soluciones de alto pH inhibiendo la corrosión.

### 8.6.2 Inhibidores

La *pasivación* consiste en la formación de una película superficial protectora de los productos metálicos más reactivo: inhibe las reacciones adicionales. Esto se refiere a la pérdida de su reactividad química debido a la implementación de una condición ambiental específica.

Algunos metales que presentan pasividad son los aceros inoxidable, níquel, titanio, aluminio, así como muchas de sus aleaciones (Figura 8.16). El Aluminio, por ejemplo, es un metal muy activo que fácilmente reacciona con el  $O_2$  presente en el aire. Esta reacción forma una capa superficial de óxido de aluminio ( $Al_2O_3$ ) tan delgada, que es transparente, inerte al oxígeno, al agua y a casi todos los agentes corrosivos que se encuentran ambientales. Un objeto hecho de aluminio formará su propia capa protectora y no habrá necesidad de tratarlo para inhibir la corrosión.



Figura 8.16. Acero inoxidable. Debido al contenido de 10-12 % de contenido de cromo, éste inhibe la corrosión provocada por el ambiente, al reaccionar con el oxígeno y formar una película pasivadora en la superficie de la tubería.

Hay dos teorías principales sobre la película pasiva:

1. Teoría de la película de óxido.
2. Teoría de la absorción.

La *teoría de la película de óxido* propone que existe una película pasiva como barrera para la difusión de los productos metálicos de la reacción que separa al metal de su ambiente, retardando la velocidad de la reacción misma.

Según la *teoría de la absorción*, los metales pasivados son cubiertos por películas de oxígeno que son absorbidas químicamente.

### 8.6.3 Protección catódica

Otra técnica para el control de la corrosión es la *protección catódica*, consiste en el suministro de electrones en el metal que se desea proteger, mediante un ánodo de sacrificio. Para tal efecto se conecta un trozo de Magnesio, Aluminio, Zinc u otro metal activo al objeto en cuestión de manera directa o a través de un cable.

Durante el proceso de protección catódica el metal activo se oxida, disolviéndose lentamente, mientras el metal menos activo adquiere electrones del agente reductor (metal activo). En el caso del acero, este material actúa como cátodo y registrará una semirreacción de reducción. El acero estará protegido mientras quede metal activo, mismo que realiza el rol de ánodo y al cual llamamos *ánodo de sacrificio* (Figura 8.17).

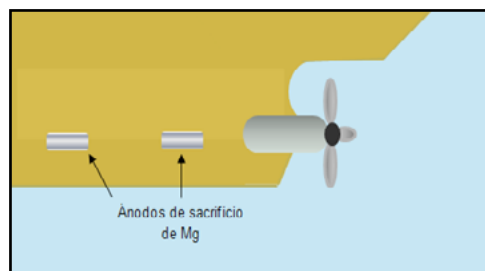


Figura 8.17. Ánodos de sacrificio para buque-tanque. Las barras de magnesio proporcionan una protección catódica a la quilla del buque-tanque, la cual está hecha de acero. Debido a que en el proceso electroquímico sólo se consume el Mg, éste será ánodo de sacrificio.



El control de la corrosión es fundamental cuando se transportan fluidos de alto riesgo como petróleo y gas. Es necesario controlar la corrosión del acero de los ductos, tanto en la parte exterior, que tiene contacto con la formación, como en la parte interior, que tiene contacto con el agua y otros agentes corrosivos. La protección catódica favorece el crecimiento de una gran industria para prevenir y controlar este proceso electroquímico, y propicia grandes derramas económicas.

**PROBLEMA TIPO:**

La empresa Petrolmex realizó un estudio, que demuestra que en el 50%, aproximadamente, de sus plataformas costa afuera comienzan a tener problemas de corrosión. Dos compañías quieren participar en el control de este deterioro. La compañía de servicios 1, sugiere la colocación de barras de Zn para protección catódica, mientras que la compañía de servicios 2, sugiere barras de Mg. Se sabe que la reacción de reducción es  $O_{2(g)} + 4H^+_{(ac)} + 4e^- \rightarrow 2H_2O_{(l)}$

- a) Obtener las reacciones de oxidación, para cada uno de los metales.
- b) Determinar el potencial de celda que forma cada metal, con su ambiente.
- c) Determinar cuál de los metales tendría una reacción más eficiente para evitar que siga avanzando la corrosión y por qué:

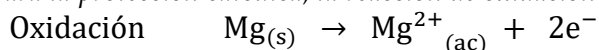
**Estrategia:**

En la tabla de serie de actividad, se puede observar la reacción del Mg y Zn en su cambio de estado sólido a su estado acuoso como ion, de ahí se obtienen las oxidaciones.

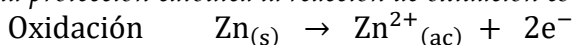
Para el inciso b, ya conocemos las reacciones de oxidación y reducción para cada una de las celdas que forman los metales y se obtienen los potenciales estándar de las tablas, para finalmente conocer el potencial de celda del Mg y Zn.

*Solución:*

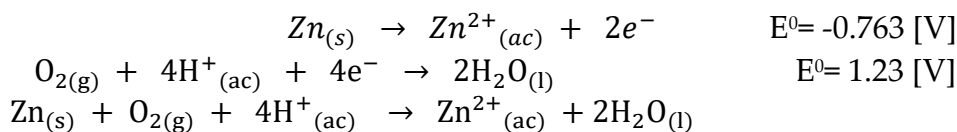
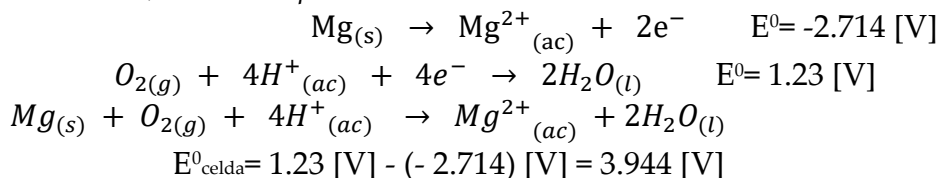
a) Cuando se utiliza Mg para la protección catódica, la reacción de oxidación es la siguiente:



Quando se utiliza Zn para la protección catódica la reacción de oxidación es la siguiente:

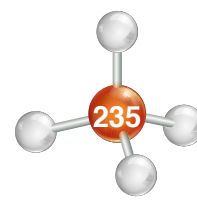


b) Una vez conocidas las reacciones, en las tablas de potenciales estándar de electrodo se obtienen los valores para cada reacción, así como el potencial total de la celda.



$$E^0_{\text{celda}} = 1.23 \text{ [V]} - (-0.763) \text{ [V]} = 1.993 \text{ [V]}$$

c) Después de obtener los potenciales de celda, se concluye que la mejor opción de metal para la protección catódica es el magnesio. El Mg es un metal más activo químicamente, se obtiene un mayor voltaje en la celda y eso lo hace reaccionar más rápidamente, mientras que el Zn es menos activo, circularía los electrones más despacio y la reducción tardaría más.





## 8.7 Aplicaciones de electroquímica para Minas y Metalurgia

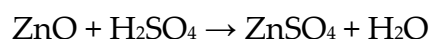
La *lixiviación* es una operación industrial que convierte sustancias naturales de interés económico en sales solubles en agua, por medio de otras sustancias previamente disueltas en el medio acuoso. La reacción química, regularmente, es del tipo de *neutralización* ya que, si las sustancias naturales se encuentran oxidadas, reaccionan con ácidos, como en el caso de los óxidos del cobre (Cu), que reaccionan con ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) diluido, para formar sulfato de cobre (CuSO<sub>4</sub>), soluble en agua.

Si las sustancias se encuentran en forma de sulfuros, es necesario oxidarlas para atacarlas con ácidos, como en el caso de la obtención de Zn a partir de concentrados de sulfuro de cinc (ZnS) que, previamente a la lixiviación, se tuestan a óxido de cinc (ZnO), por medio de aire a alta temperatura. El ZnO producido en la tostación se neutraliza con H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> diluido para formar sulfato de cinc (ZnSO<sub>4</sub>) soluble en agua.

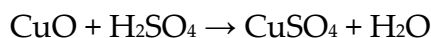
Si la sustancia mineral se encuentra en forma nativa, como el oro (Au), es necesario utilizar otro tipo de reacción, diferente a la neutralización. En este caso se provoca una reacción de *complejación* por medio de cianuro de sodio (NaCN) en medio acuoso alcalino, que requiere de oxidación del Au por medio de aire durante la lixiviación.

En comparación con las operaciones pirometalúrgicas, la lixiviación es más fácil de realizar y mucho menos dañina, ya que no produce contaminación gaseosa. Algunos inconvenientes de esta práctica son su alta acidez de trabajo, sus efluentes residuales tóxicos, en algunos casos, y su menor eficiencia a bajas temperaturas, las cuales afectan la recuperación y velocidad de la reacción química.

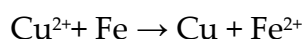
El mineral usado para la lixiviación puede ser oxidado o sulfurado. Por ejemplo, para un mineral oxidado, una reacción de lixiviación ácida simple puede ser ilustrada mediante la reacción del óxido de zinc:



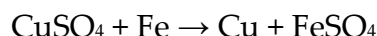
Para un óxido de cobre como CuO:



El ácido sulfúrico en solución acuosa reacciona con el ZnO u CuO para formar sulfatos solubles en agua. Después de separar las soluciones de los sólidos insolubles (ganga) se pueden purificar y/o concentrar para después y por distintos métodos químicos, obtener los metales Cu y Zn en forma metálica. Para el caso del Cu, a la solución con CuSO<sub>4</sub> puede agregársele chatarra de Fe para que le transfiera electrones al Cu<sup>2+</sup> del sulfato de cobre. Este se reduce a Cu elemental y precipita en forma de polvo, debido a una reacción redox electrofítica: el hierro queda disuelto como sulfato ferroso. Esta reacción puede ser representada como:

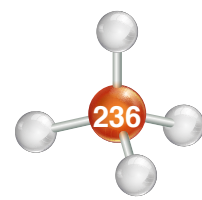


o



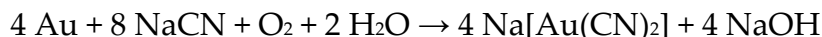
A continuación, se separa mecánicamente el cobre del líquido acuoso. La reacción es conocida como *proceso de cementación*.

La separación del Zn de la solución ácida de ZnSO<sub>4</sub> se realiza mediante un proceso electrofítico, depositando el Zn sobre cátodos de aluminio. Desde la solución de sulfato de zinc en una celda que tiene ánodos insolubles, se aplica corriente directa y el Zn se reduce (gana electrones en el cátodo) de acuerdo con la siguiente reacción:





Cuando el oro de un mineral es disuelto con NaCN, forma una sal soluble en agua denominada aurocianuro de sodio, expresada en la siguiente reacción química:



La solución aurífera se separa del sólido estéril, se purifica, desoxigena, y se le agrega Zn metálico en polvo. El Au del Na[Au(CN)<sub>2</sub>] en solución se precipita en forma de polvo fino, al reducirse con los electrones que le transfiere el Zn, de acuerdo en la reacción electrolítica de cementación:



El precipitado de oro se separa mecánicamente de la solución, se trata químicamente y se funde a Doré, aleación de oro-plata.

## 8.8 Autoevaluación

### Cuestionario de autoevaluación del capítulo 8

#### Cuestionario de autoevaluación tema 8.2

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

- Encuentre el número de oxidación de cada uno de los elementos en la molécula Ca(HSO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>
  - Ca: 2+, H: 1+, S: 2-, O: 2-
  - Ca: 2+, H: 1+, S: 2+, O: 2-
  - Ca: 2+, H: 1+, S: 4+, O: 2-
  - Ca: 2+, H: 1+, S: 6+, O: 2-
- Encuentre el número de oxidación del manganeso (Mn) en el KMnO<sub>4</sub>.
  - 2
  - 3
  - 6
  - 7

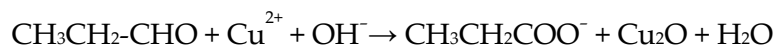
1. Indique cuáles de las reacciones siguientes son de óxido-reducción:

- $\text{P} + \text{KOH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{KH}_2\text{PO}_2 + \text{PH}_3$
  - $\text{CaCO}_3 + \text{HCl} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{CaCl}_2 + \text{H}_2\text{O}$
  - $\text{Cr}^{3+} + \text{I}^- + \text{OH}^- + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CrO}_4^{2-} + \text{IO}_4^- + \text{Cl}^- + \text{H}_2\text{O}$
- a) I, II      b) I, II, III      c) I, III      d) II, III

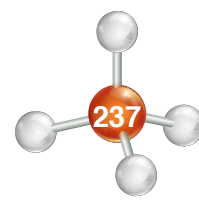
2. Identifique si existe oxidación o reducción en cada una de las siguientes reacciones:

- $\text{Na} \rightarrow \text{Na}^+$
  - $\text{NO}_3^- \rightarrow \text{NO}$
  - $\text{AuCl}_4^- \rightarrow \text{AuCl}_2^-$
- a) oxidación; II) oxidación; III) reducción  
b) I) oxidación; II) reducción; III) reducción  
c) I) reducción; II) oxidación; III) oxidación  
d) I) reducción; II) reducción; III) oxidación

3. Encuentre el coeficiente estequiométrico para el OH<sup>-</sup> en la siguiente ecuación química:



- a) 2      b) 3      c) 4      d)





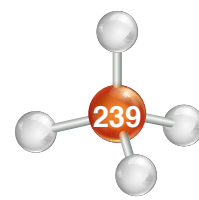




## Cuestionario de autoevaluación del tema 8.4

Instrucciones: Lee atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraya la respuesta correcta.

- Encuentre el mejor ánodo entre los siguientes electrodos  
Ag, Cu, H<sub>2</sub> y Hg  
a) Ag      b) Cu      c) H<sub>2</sub>      d) Hg
- Trace el diagrama de las pilas cuyas reacciones son las siguientes:  
I.      Cl<sub>2</sub>(g) + Cd(s) → Cd<sup>2+</sup>(ac) + 2 Cl<sup>-</sup>(ac)  
II.     2 Fe<sup>2+</sup>(ac) + Cl<sub>2</sub>(g) → 2 Fe<sup>3+</sup>(ac) + 2 Cl<sup>-</sup>(ac)  
a) Cd(s) | Cd<sup>2+</sup>(ac) || Cl<sup>-</sup>(ac) | Cl<sub>2</sub>(g) ; Fe<sup>2+</sup>(ac), Fe<sup>3+</sup>(ac) || Cl<sup>-</sup>(ac) | Cl<sub>2</sub>(g)  
b) Cl<sup>-</sup>(ac) | Cl<sub>2</sub>(g) || Cd(s) | Cd<sup>2+</sup>(ac) ; Fe<sup>2+</sup>(ac), Fe<sup>3+</sup>(ac) || Cl<sup>-</sup>(ac) | Cl<sub>2</sub>(g)  
c) Cd(s) | Cd<sup>2+</sup>(ac) || Cl<sup>-</sup>(ac) | Cl<sub>2</sub>(g) ; Cl<sup>-</sup>(ac) | Cl<sub>2</sub>(g) || Fe<sup>2+</sup>(ac), Fe<sup>3+</sup>(ac)  
d) Cl<sup>-</sup>(ac) | Cl<sub>2</sub>(g) || Cd(s) | Cd<sup>2+</sup>(ac) ; Cl<sup>-</sup>(ac) | Cl<sub>2</sub>(g) || Fe<sup>2+</sup>(ac), Fe<sup>3+</sup>(ac)
- Se monta una pila voltaica en la cual un compartimento tiene en una tira de cadmio colocada en una solución de Cd(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> y en el otro una tira de níquel colocada en una solución de NiCl<sub>2</sub>. Entre ambos compartimentos existe un puente salino. La reacción total de la pila es:  
$$\text{Cd(s)} + \text{Ni}^{2+}(\text{ac}) \rightarrow \text{Cd}^{2+}(\text{ac}) + \text{Ni(s)}$$
  
I.      Determine qué electrodo se oxida y cuál se reduce  
II.     Determine cuál electrodo es el ánodo y cuál es el cátodo  
a) Cd se oxida, ánodo; Ni<sup>2+</sup> se reduce, cátodo  
b) Cd se oxida, cátodo; Ni<sup>2+</sup> se reduce, ánodo  
c) Ni se oxida, cátodo; Cd<sup>2+</sup> se reduce, ánodo  
d) Ni se oxida, ánodo; Cd<sup>2+</sup> se reduce, cátodo
- Calcule la FEM asociada a la reducción de ion bromato, BrO<sub>3</sub><sup>-</sup>, mediante zinc en solución ácida. Los potenciales de reducción normales de las semireacciones son:  
$$\text{BrO}_3^- + 3\text{H}_2\text{O} + 6\text{e}^- \rightarrow \text{Br}^- + 6\text{OH}^-$$
$$\text{Zn}^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Zn}$$
  
a) -1.37 volt      b) -0.15 volt      c) 0.15 volt      d) 1.37 volt
- Determine si los metales Zn y Cu se disolverán en HCl 1M, a través del cálculo de potenciales estándar de celda. El potencial normal del hidrógeno es el que corresponde al HCl.  
a) Zn: disuelve, Cu: disuelve  
b) Zn: disuelve, Cu: no disuelve  
c) Zn: no disuelve, Cu: disuelve  
d) Zn: no disuelve, Cu: no disuelve





### Cuestionario de autoevaluación del tema 8.5

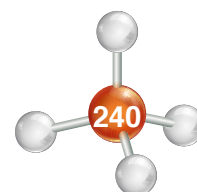
Instrucciones: Lee atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraya la respuesta correcta.

- Se lleva a cabo un proceso electrolítico durante 10 minutos, obteniendo una carga total de 400 [C] ¿Qué cantidad de corriente se empleó?  
a) 0.667                      b) 40                      c) 4000                      d) 240,000
- Determine el número de Faradays que se requieren para producir dos moles de metal libre a partir de los siguientes cationes de  $\text{Hg}^{2+}$   
a) 1                      b) 2                      c) 4                      d) 8
- Calcule la masa de oro depositada por electrólisis del sulfato de oro (III) si se aplica una corriente de 0.3 [A] durante 20 horas.  
a) 0.01 [g]                      b) 14.73 [g]                      c) 44.09 [g]                      d) 132.30 [g]
- Determine el metal del que se trata, si se emplea una cantidad de carga de 14475 [C] para depositar 8.43 [g] de un metal a partir de una disolución que contiene iones dipositivos.  
a) Au                      b) Cd                      c) Cs                      d) Pd
- Una cuba electrolítica contiene 1500 [ml] de una disolución de  $\text{CuSO}_4$ . Al pasar una corriente de 1.8 [A] durante 16 horas, se deposita todo el cobre de la disolución. Calcule la molaridad de la disolución inicial de  $\text{CuSO}_4$   
a)  $9.9 \times 10^{-5}$  [M]                      b) 0.11 [M]                      c) 0.36 [M]                      d) 0.71 [M]

### Cuestionario de autoevaluación del tema 8.6

Instrucciones: Lee atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraya la respuesta correcta.

- ¿Cómo se define al deterioro físico y cambio químico que padece un metal debido al ataque del oxígeno presente en su ambiente?  
a) Ataque químico                      b) Corrosión                      c) Pasivación                      d) Oxidación
- ¿En qué consiste la protección catódica para el control de la corrosión?  
a) En la eliminación de electrones en el metal que se desea proteger  
b) En el suministro de electrones en el metal que se desea proteger  
c) En el recubrimiento del metal que se desea proteger  
d) En la oxidación del metal que se desea proteger
- ¿Qué metal de los siguientes presenta pasivación?  
a) Aluminio                      b) Hierro                      c) Plomo                      d) Sodio
- Si se tiene los siguientes electrodos  
$$\text{Hg}^{2+} + 2e^- \rightarrow \text{Hg}^\circ$$
$$\text{Au}^{3+} + 3e^- \rightarrow \text{Au}^\circ$$
¿Cuál de los siguientes metales usaría como ánodo de sacrificio?  
a) Ag                      b) Cu                      c) Hg                      d) Pb
- Si en una tubería se está presentando un problema de corrosión donde se sabe que la reacción de oxidación es la siguiente:  
$$\text{Cr}^\circ \rightarrow \text{Cr}^{3+} + 3e^-$$
Indique cuál electrodo de los siguientes usaría para llevar a cabo una protección catódica.  
a) Al                      b) Fe                      c) Sn                      d) V





# Capítulo 9

## Química Orgánica

Ricardo Alfaro Fuentes, Javier Arellano Gil, Marco Antonio Rubio Ramos,  
Carlos Manuel Toscano Morales, Basilio Eslava Soto,  
Luisa Adriana Tortolero Camacho, Yisel Anaid Animas Gómez

### 9.1 Introducción

Este capítulo se referirá a la importancia de la química orgánica y el papel que juega en las Ciencias de la Tierra. Como primer punto se hablará acerca de la química del carbono, sus hibridaciones y los tipos de enlace que puede llegar a generar.

Se abordarán temas como clasificación, nomenclatura, estructuras, radicales, isomería, geometría, grupos funcionales, así como sus usos y aplicaciones en el área de Ciencias de la Tierra.

La química orgánica es fundamental para explicar lo referente a la composición y propiedades de los hidrocarburos y del carbón mineral, que corresponden a las principales fuentes de energía.

#### Sumario

##### 9.1 Introducción

##### 9.2 Hibridación del átomo de carbono en los compuestos orgánicos

##### 9.3 Alcanos

##### 9.4 Alquenos

##### 9.5 Alquinos

##### 9.6 Principales grupos funcionales en la química orgánica, nomenclatura y propiedades

##### 9.7 Reacciones de adición y de eliminación

##### 9.8 Aplicaciones de química orgánica

##### 9.9 Autoevaluación

### 9.2. Hibridación del átomo de carbono en los compuestos orgánicos

#### 9.2.1 Átomo de carbono y su hibridación

En el caso del elemento carbono se sabe que su número atómico es igual a seis, por lo que para mantener su neutralidad eléctrica existirán seis electrones, los cuales estarán ordenados de acuerdo con su configuración electrónica (Figura 9.1), la cual representa el arreglo de los electrones en los niveles 1 y 2 de energía, en donde se tienen los orbitales s y p (1s, 2s y 2p).

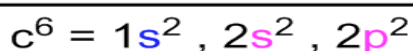
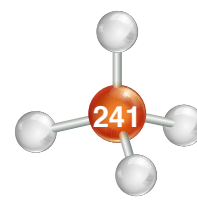


Figura 9.1. Configuración electrónica del átomo de carbono.

En términos de energía, la configuración electrónica muestra los diferentes niveles de energía que les corresponden a los electrones de un átomo, en otras palabras, indica los diferentes niveles probables donde se localizan los electrones. Entonces referimos que, para el caso del carbono, se ocupan

los dos primeros niveles de energía, para el nivel 1 el orbital (s) y para el nivel 2, los orbitales (s y p) (Figura 9.2). Es importante indicar que los orbitales son funciones matemáticas que nos indican la mayor probabilidad de en donde se encuentran los electrones.





En la Figura 9.2, se pueden observar todos los electrones presentes en el átomo; pero esto ocurre sólo cuando está aislado, ya que en el momento en que empieza a tener interacciones con otros átomos, el carbono cambiará su arreglo electrónico para formar enlaces estables. En el caso del nivel  $n=1$  del carbono, al estar completo se cierra a sí mismo, constituyendo el CORE.<sup>3</sup> Los demás electrones del nivel  $n=2$  sufren modificaciones, los orbitales  $2s$  y  $2p$  se alteran, la energía del orbital  $2s$  se incrementa y los tres orbitales  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$  disminuyen en energía, generando, al final, cuatro orbitales al mismo nivel de energía, tal y como se puede apreciar en la Figura 9.3. Estos cuatro orbitales reciben el nombre de *orbitales degenerados*.

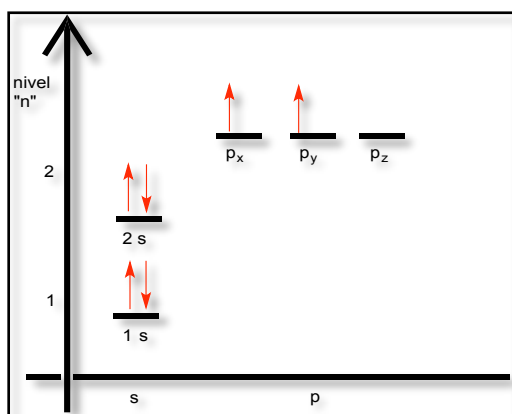


Figura 9.2. Niveles de energía.

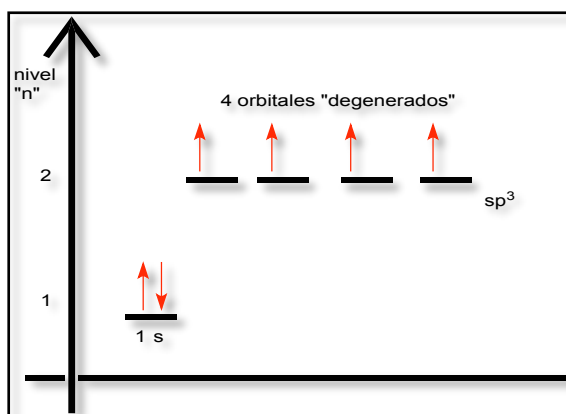


Figura 9.3. Orbitales degenerados del carbono.

Es entonces que los cuatro orbitales degenerados permiten explicar de manera sencilla, una de las características fundamentales del carbono: su tetravalencia, cualidad que indica que el carbono siempre formará cuatro enlaces con otros elementos y, de igual forma, su capacidad para concatenarse<sup>6</sup> para formar cadenas más grandes.

En la Figura 9.4 se observa la molécula de metano, que es el hidrocarburo saturado más simple, al formar cuatro enlaces por compartición de uno de los electrones del hidrógeno con uno de los electrones de los orbitales degenerados. Esta relación de orbitales también explica por qué el carbono puede presentar las hibridaciones  $sp^3$ ,  $sp^2$  y  $sp$ .

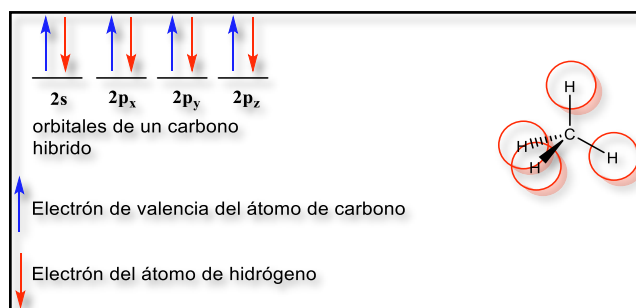


Figura 9.4. Arreglo de los electrones en la molécula de metano.

### 9.2.2 Hibridación $sp^3$

Una vez conocida la noción de orbital degenerado se puede comprender rápidamente a qué corresponde la hibridación  $sp^3$ , que es la combinación de un orbital "s" y tres "p". Como todos los orbitales  $sp^3$  son degenerados significa que tienen el mismo nivel de energía y que todos los enlaces son iguales. En orgánica son denominados *enlaces simples* o *tipo sigma* ( $\sigma$ ), los cuales poseen una estructura tetraédrica al ocupar los enlaces en dirección a los vértices de la figura geométrica y el ángulo entre los dos enlaces es de  $109.5^\circ$ . (Figura 9.5).

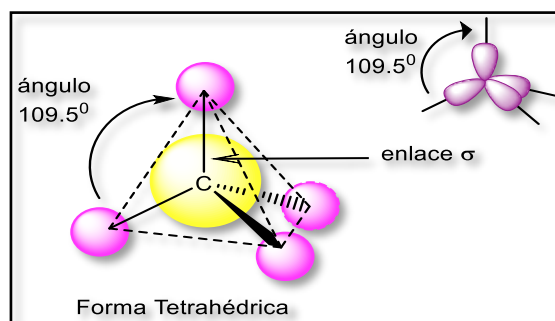
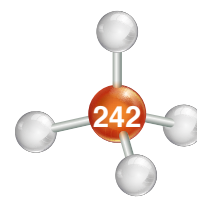


Figura 9.5. Hibridación  $sp^3$  del carbono.

<sup>3</sup> CORE o caraza central, parte nuclear del átomo que no se altera cuando los átomos interactúan para formar una sustancia.

<sup>6</sup> Concatenación: Capacidad de un átomo para asociarse a otros átomos del mismo elemento, formando largas cadenas.





### 9.2.3 Hibridación $sp^2$

Los compuestos en química orgánica son capaces de formar enlaces sencillos, dobles o triples. Si se trata de un enlace doble el modelo de orbitales indica que tres orbitales están degenerados, con un mismo nivel de energía: un orbital  $s$  y dos  $p$ , y un orbital  $p$  no híbrido. Esto muestra que tres enlaces son sencillos y el cuarto sólo se da entre carbonos de la misma hibridación. El doble enlace conocido como *enlace  $\pi$*  ( $\pi$ ), el cual se forma entre los orbitales  $p$  no híbridos (Figura 9.6). En esta hibridación se pueden observar tres enlaces sencillos perpendiculares al orbital  $p$  no híbrido y que generan un arreglo parecido a un sistema plano donde la repulsión de los orbitales entre sí obliga a ordenarse como un triángulo. Esta configuración es denominada *triangular planar* (Figura 9.7), y nos explica por qué el átomo con hibridación  $sp^2$  tiene un ángulo de enlace de  $120^\circ$ .

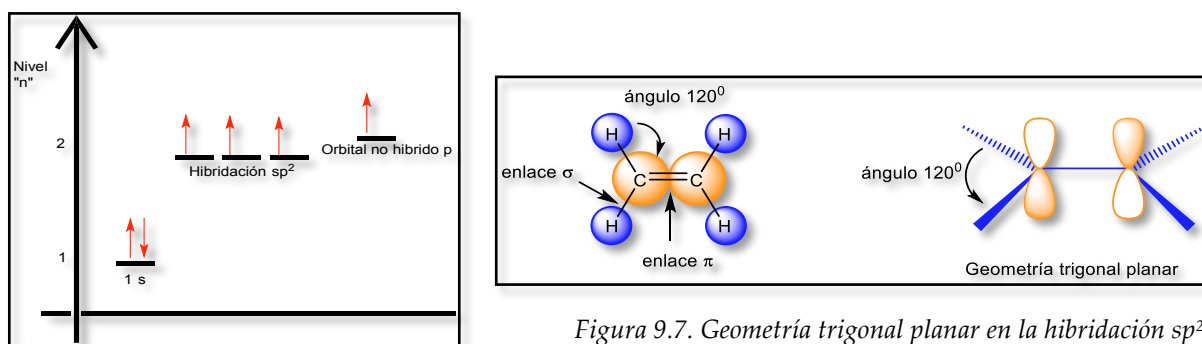


Figura 9.6. Hibridación  $sp^2$  del carbono.

Figura 9.7. Geometría triangular planar en la hibridación  $sp^2$ .

### 9.2.4 Hibridación $sp$

Esta hibridación se refiere a que solamente se tienen dos orbitales híbridos ( $s$  y  $p$ ), mientras que los otros dos son  $p$  no híbridos (Figura 9.8). Este arreglo explica cómo los compuestos de triple enlace que presentan una hibridación  $sp$  son lineales con un ángulo de  $180^\circ$  y presentan dos enlaces sencillos tipo  $\sigma$  y los dos dobles enlaces tipo  $\pi$ , tal y como se aprecia en la Figura 9.9. En la Tabla 9.1 se muestra un resumen de los tipos de hibridación.

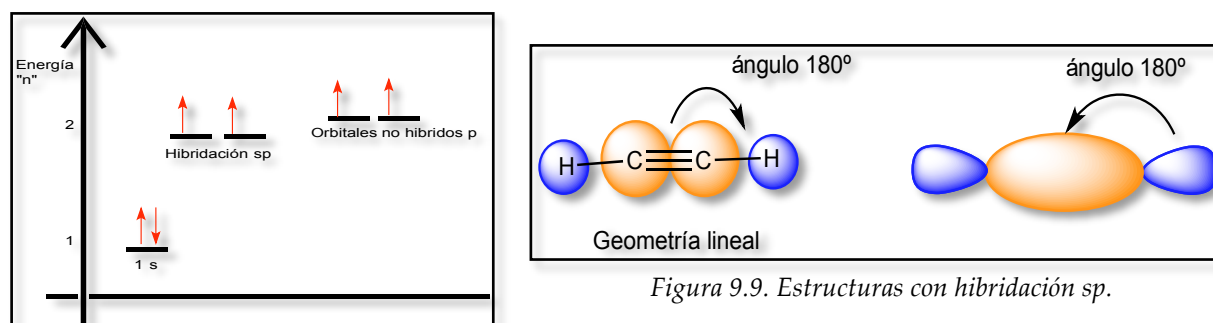


Figura 9.8. Representación de los orbitales  $sp$ .

Figura 9.9. Estructuras con hibridación  $sp$ .

Tabla 9.1. Resumen comparativo de las hibridaciones del carbono

Hibridación	Geometría	Tipo de enlaces	Ángulo
$sp^3$	tetraédrica	4 $\sigma$	$109.5^\circ$
$sp^2$	Trigonal planar	3 $\sigma$ y 1 $\pi$	$120^\circ$
$sp$	Lineal	2 $\sigma$ y 2 $\pi$	$180^\circ$





### 9.2.5 Enlaces tipo sigma y tipo pi

En química orgánica se pueden diferenciar dos tipos de enlaces: los enlaces *tipo sigma* ( $\sigma$ ) generados por la combinación unidireccional de los orbitales, y los enlaces *tipo pi* ( $\pi$ ) que se forman por la combinación lateral de los orbitales no híbridos del átomo de carbono. La combinación de dos orbitales para conformar un enlace es denominada *traslape de orbitales*.

Los enlaces sencillos, que son los enlaces de *tipo sigma* ( $\sigma$ ), se pueden generar por la combinación lineal de un orbital "s" y un orbital "p" (Figura 9.10), o por el traslape lineal de dos orbitales "p" (Figura 9.11). Para este tipo de enlace la longitud entre núcleos de los átomos de carbono es de 1.54 [Å].

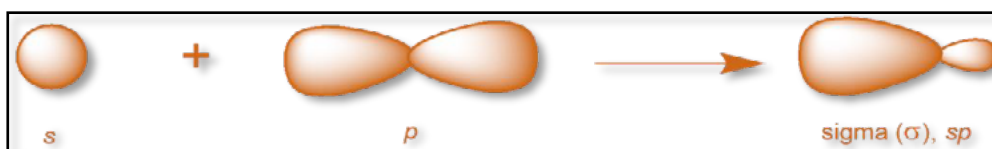


Figura 9.10. Enlace de tipo sigma ( $\sigma$ ) al traslaparse los orbitales s y p.

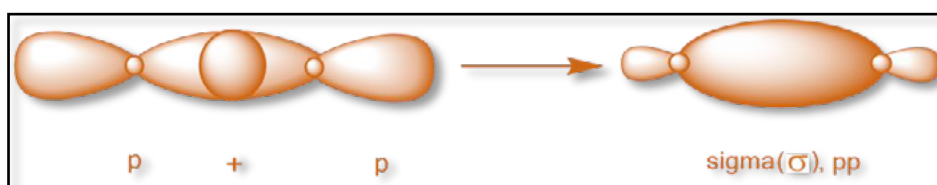


Figura 9.11. Enlace de tipo sigma ( $\sigma$ ) al traslaparse dos orbitales p.

Los enlaces *tipo pi* ( $\pi$ ) se forman por el traslape lateral de dos orbitales "p" no híbridos generando dos nubes paralelas al plano de los carbonos que constituyen el doble enlace (Figura 9.12).

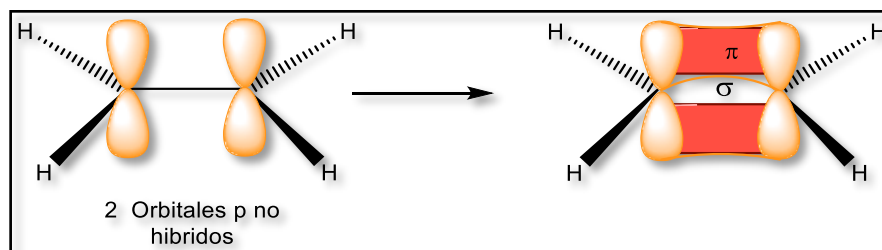


Figura 9.12. Traslape de 2 orbitales p, enlace pi ( $\pi$ ).

Hasta este momento se ha indicado cómo se denotan las interacciones electrónicas entre átomos para la formación de enlaces; sin embargo, también es importante describir que cuando no se lleva a cabo un traslape de los orbitales, se producen interacciones denominadas *antienlaces*, las cuales son indicadas con un asterisco. Entonces, un antienlace sigma será  $\sigma^*$  y un antienlace pi será  $\pi^*$  (Figura 9.13).

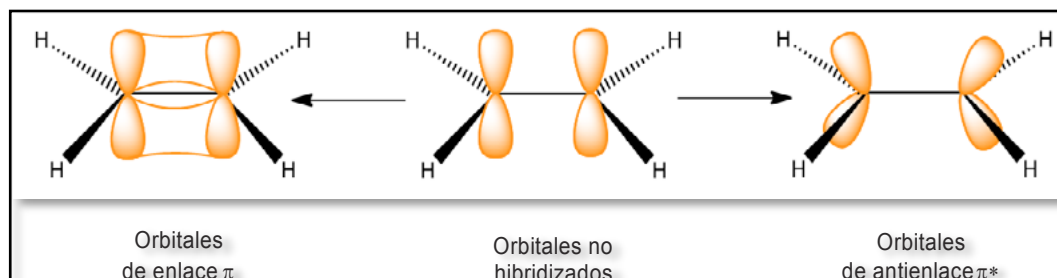


Figura 9.13. Representación de enlace pi  $\pi$  y de un anti-enlace  $\pi^*$ .



### 9.3. Alcanos

Los **hidrocarburos** son compuestos constituidos por átomos de carbono y de hidrógeno, en los que el carbono es el único átomo capaz de unirse entre sí para formar cadenas lineales, ramificadas, abiertas o cerradas, tales como el pentano, el ciclohexano o el isopentano (Figura 9.14).

Los **alcanos** son moléculas de cadena abierta o cerrada unidos por enlaces sencillos. Estos compuestos son clasificados, genéricamente, como **hidrocarburos alifáticos** (alifático proviene de la palabra griega *aleiphar* que significa "grasa"). Debido a que están conformados por enlaces sencillos pertenecen a los **hidrocarburos saturados**. Los alcanos son también conocidos como **parafinas** (que en latín significa "poca afinidad"), en virtud de su mínima reactividad química a temperatura ambiente y no son afectados por ácidos o bases fuertes, a causa de la naturaleza de sus enlaces covalentes no polares.

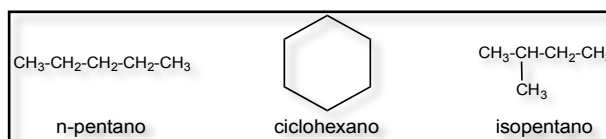


Figura 9.14. Representación de los enlaces lineales del pentano, ramificados cerrados del ciclohexano y ramificados abiertos del isopentano, respectivamente.

Los carbonos de los alcanos presentan hibridación  $sp^3$ , con ángulo entre sus enlaces de  $109.5^\circ$  y forman un enlace sencillo denominado  $\sigma$  (sigma). La fórmula general de los alcanos es  $C_nH_{2n+2}$ , con la cual podemos determinar su estructura condensada. Un ejemplo de esta fórmula es el etano, compuesto por dos carbonos. Esto implica que el número de hidrógenos en la molécula es  $2(2)+2=6$ ,  $C_2H_6$  (Figura 9.15).

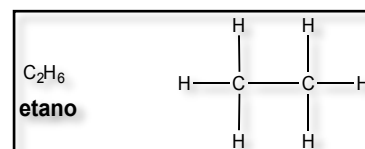


Figura 9.15. Fórmula del etano y su estructura desarrollada.

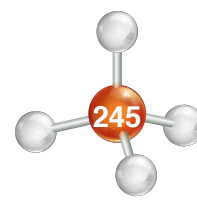
#### 9.3.1 Nomenclatura

A fines del siglo XIX y principios del XX, los componentes orgánicos se nombraban conforme sus descubridores los designaban. Tal es el caso de la morfina, nombrada así en honor de Morfeo, dios griego del sueño. Para evitar confusiones fue fundada la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC, por sus siglas en inglés), organismo encargado de asignar, de forma sistemática, los nombres de los compuestos químicos.

Los alcanos conforme a la IUPAC, con un prefijo numeral (met, un átomo de carbono; et, dos átomos de carbono; prop, tres átomos de carbono; but, cuatro átomos de carbono y así sucesivamente), seguido del sufijo "ano" que los categoriza como alcanos. La Tabla 9.2 presenta algunos prefijos usados para determinar el nombre de los hidrocarburos. El hexano, por ejemplo, es un alcano con seis átomos de carbono.

# C	Prefijo	# C	Prefijo	# C	Prefijo	# C	Prefijo
1	met	11	undec	21	heneicos	40	tetracont
2	et	12	dodec	22	docos	50	pentacont
3	prop	13	tridec	23	tricos	60	hexacont
4	but	14	tetradec	24	tetracos	70	heptacont
	pent	15	pentadec	25	pentacos	80	octacont
6	hex	16	hectadec	26	hexacos	90	nonacont
7	hept	17	heptadec	27	heptacos	100	hect
8	oct	18	octadec	28	octacos	200	dihect
9	non	19	nonadec	29	nonacos	300	trihect
10	dec	20	eicos	30	triacont	400	tetrahect

Tabla 9.2. Numerales de los carbonos. Los prefijos indican el número de átomos de carbono. Al final se agrega el sufijo "ano" para el caso de los alcanos.





### 9.3.2 Tipos de estructuras

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

Los *alcanos lineales* son moléculas de cadena abierta con enlaces sencillos tipo  $\sigma$  (sigma). Los alcanos más comunes pueden ser representados mediante su estructura molecular, desarrollada y semidesarrollada (Figura 9.16).

Nombre y fórmula molecular	Fórmula desarrollada	Fórmula semidesarrollada
CH <sub>4</sub> Metano	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$	CH <sub>4</sub>
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> Etano	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	CH <sub>3</sub> -CH <sub>3</sub>
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> Propano	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> n-Butano	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \quad   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \quad   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> n-Pentano	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \quad   \quad   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \quad   \quad   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> n-Hexano	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \quad   \quad   \quad   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \quad   \quad   \quad   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> n-Heptano	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \quad   \quad   \quad   \quad   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \quad   \quad   \quad   \quad   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> n-Octano	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \quad   \quad   \quad   \quad   \quad   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \quad   \quad   \quad   \quad   \quad   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>

Figura 9.16. Alcanos más comunes ("n- indica que no existen ramificaciones. La estructura es, por tanto, lineal).

Los compuestos que tienen la misma fórmula molecular, pero sus átomos presentan diferente orden en su estructura, son llamados *isómeros*. Para nombrarlos, se colocan prefijos al nombre del hidrocarburo: *iso* o *neo*. La Figura 9.17 muestra cuatro ejemplos de esta isomería.

Entre las características físicas más notables de los alcanos, se destaca el hecho que, del metano al butano, los hidrocarburos son gases; del pentano al nonadecano son líquidos y del eicosano en adelante se encuentran en fase sólida.

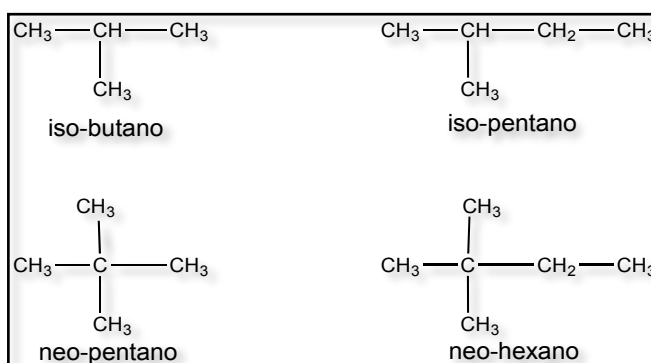
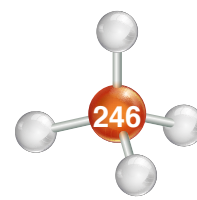


Figura 9.17. Hidrocarburos isómeros con prefijos iso y neo.





### 9.3.3 Tipos de carbono (de acuerdo con el número de carbonos enlazados)

Los átomos de carbono se clasifican de acuerdo con el número de otros átomos de carbono a los que se encuentra unido. Por ejemplo, un carbono primario es el que se encuentra unido solo a un átomo de carbono y los demás enlaces a hidrógenos; un carbono secundario está unido a dos átomos de carbono; el terciario a tres y el cuaternario a cuatro (Figura 9.18).

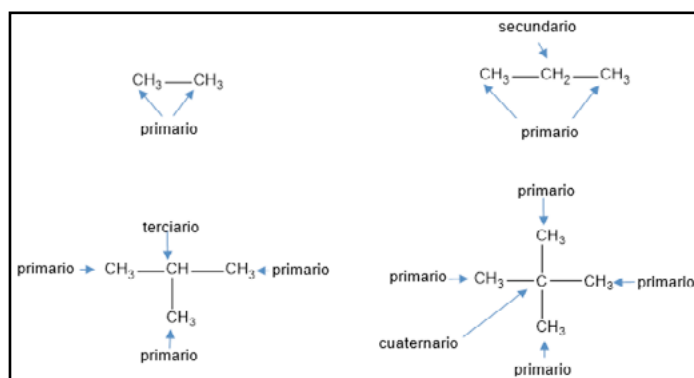


Figura 9.18. Ejemplo de carbono primario, secundario, terciario y cuaternario.

### 9.3.4 Representaciones de los hidrocarburos

Tanto para los hidrocarburos como para cualquier estructura en química orgánica, existe una representación más, aparte de las indicadas como fórmulas moleculares, estructura semidesarrollada o estructura desarrollada. Esta representación, más simple no supe a las anteriores, ya que sólo representa a los compuestos. Para hacer más fácil su escritura, se emplean líneas y puntos: las líneas representan los enlaces y cada vértice o punto al final de la línea representa un carbono (Figura 9.19). Los enlaces carbono-hidrógeno, se omiten.

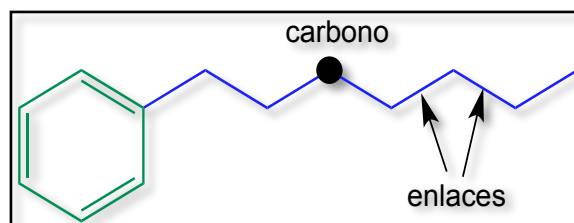


Figura 9.19. Representación de un compuesto orgánico

### 9.3.5 Radicales hidrocarbonados

Un *radical* es generado por la substracción de un hidrogeno que se encontraba unido a un alcano, independientemente de si se trata de un carbono primario, secundario o terciario. Esta valencia libre se puede unir, posteriormente, a otra estructura o hidrocarburo. Para nombrarlos, la terminación “*ano*” del hidrocarburo se cambia por la terminación “*il*” o “*ilo*” (Figura 9.20). La Figura 9.21 contiene algunos ejemplos.

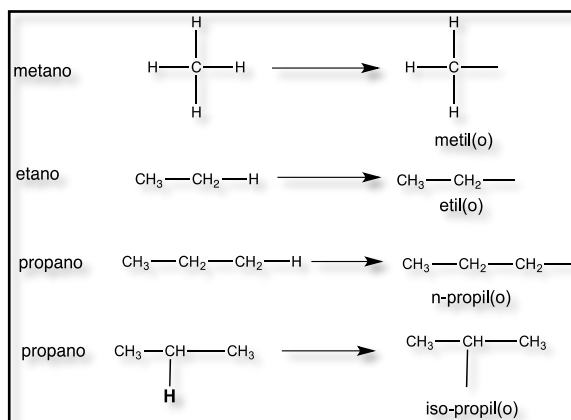


Figura 9.20. Ejemplos de radicales. (La terminación “*ano*” cambia por “*il*” o “*ilo*”).

### 9.3.6 Reglas para la asignación de nombres en hidrocarburos de cadena larga y ramificada

Los hidrocarburos formados por átomos de carbono y que presentan al menos una ramificación, no pueden ser nombrados sólo por el número de carbono que las contenga. Para evitar confusiones se siguen una serie de pasos para identificarlos y nombrarlos correctamente:



Nombre	Fórmula desarrollada	Fórmula semidesarrollada
metil	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}- \\   \\ \text{H} \end{array}$	CH <sub>3</sub> —
etil	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}- \\   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	CH <sub>3</sub> —CH <sub>2</sub> —
propil	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}- \\   \quad   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	CH <sub>3</sub> —CH <sub>2</sub> —CH <sub>2</sub> —
isopropil	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	CH <sub>3</sub> —CH—CH <sub>3</sub> 
isobutil	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}- \\   \quad   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_2- \end{array}$
secbutil	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \quad   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \quad   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	CH <sub>3</sub> —CH—CH <sub>2</sub> —CH <sub>3</sub> 
terbutil	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_3 \\   \end{array}$

Figura 9.21. Ejemplos de los radicales del grupo alquilo.

1. Identificar la cadena más larga del hidrocarburo de entre las combinaciones posibles. Es preferible que la cadena elegida tenga los sustituyentes más simples posibles. El número de carbonos de la cadena más larga determina el nombre principal de la cadena (Figura 9.22).

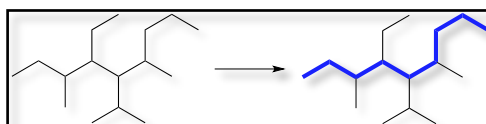


Figura 9.22. Identificación de la cadena más larga de un hidrocarburo.

2. Numerar los átomos de carbono de la cadena, comenzando por el extremo donde se encuentra más cercano uno de los sustituyentes (Figura 9.23).

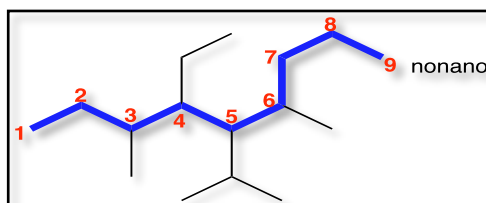
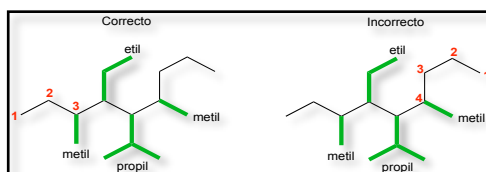


Figura 9.23. Numeración de los átomos de carbono que componen el hidrocarburo.

3. Una vez numerados los átomos, se deben identificar los sustituyentes unidos a la cadena principal e identificar el número de carbono en donde se encuentra el radical (Figura 9.24).

Figura 9.24. Numerar la cadena comenzando del lado que se encuentre más cercano al primer sustituyente.







- En caso de que dos o más sustituyentes se repitan, se deben colocar los prefijos numerales di, tri, tetra, penta, etc., para indicar cuántos de ellos están presentes. Por ejemplo: existen dos metilos en la Figura 9.24. Su nombre no repetirá los dos metilos, sino que se debe escribir como dimetil. Posteriormente, se procede a asignar un número, el cual indica la posición en la que se encuentra el grupo radical enlazado a la cadena principal. Al tener dos o más radicales, los números son separados por comas y los radicales de los números por guiones (Figura 9.25).

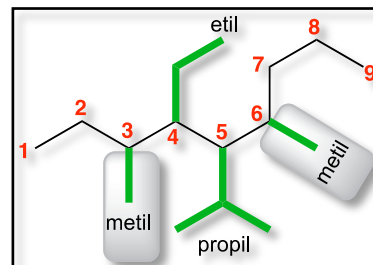


Figura 9.25 Dentro de los sustituyentes se encuentra el metil dos veces enlazado, en el carbono 3 y 6 de la cadena, por lo tanto, se indicará como "3,6-dimetil".

- Para dar nombre final al compuesto, primero se escriben los sustituyentes en orden alfabético, sin tomar en cuenta los prefijos numerales (di, tri, tetra, etc.). Se debe colocar el número seguido de un guion y, en caso de tener dos números, se separan con una coma. Una vez colocado todos los sustituyentes, se escribe al final el nombre de la cadena principal (Figura 9.26).

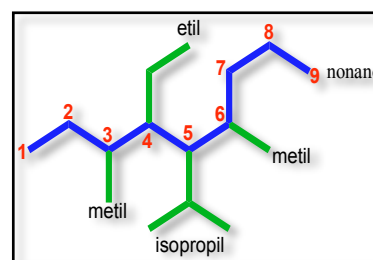


Figura 9.26. 4-etil-5-isopropil-3,6-dimetilnonano.

Es fácil caer en confusión al elegir la cadena principal de la molécula. En el ejemplo siguiente se indica incorrectamente la forma de nombrar la molécula del nonano con cuatro sustituyentes (Figura 9.27).

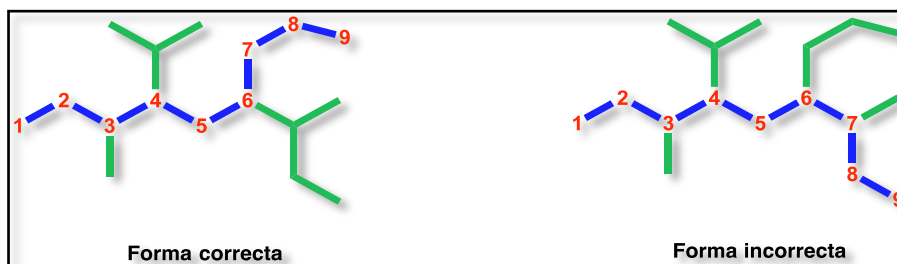


Figura 9.27. Forma correcta e incorrecta de elegir la cadena principal de un hidrocarburo.

### 9.3.7 Cicloalcanos

Además de los *hidrocarburos de cadena abierta*, existen, en la naturaleza, otros en los que la cadena se cierra formando un anillo, los cuales dependen directamente del número de carbonos que lo contienen. Estos son los llamados *hidrocarburos cíclicos*. Estos poseen un punto de ebullición y una densidad mayor que la del alcano con el mismo número de átomos de carbono y su fórmula general es:  $C_nH_{2n}$ . Se debe tener cuidado con esta fórmula, ya que, como se explicará más adelante, corresponde también a la de los alquenos, aunque se pueden distinguir rápidamente porque a éstos se antecede la palabra "ciclo" seguida del hidrocarburo de acuerdo con su número de átomos de carbono. La estructura más simple que existe corresponde al anillo de tres miembros denominado *ciclopropano*, en el caso de cuatro, ciclobutano y así sucesivamente (Figura 9.28). Estos compuestos también son conocidos como *naftenos* dentro de la industria petrolera.

Los cicloalcanos pueden tener de tres a treinta átomos de carbono. Los más abundantes son el ciclopropano y el ciclohexano. Mientras que el ciclopropano y el ciclobutano son gases a temperatura ambiente, el resto son líquidos.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

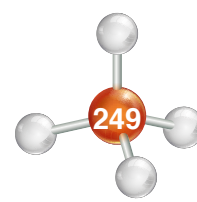
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





Cuando los anillos pequeños son sometidos a mucha presión, se genera una disminución del valor de sus ángulos entre los enlaces, con respecto a sus ángulos normales ( $109^\circ$ ). En los compuestos lineales, el ciclopropano tiene un ángulo de  $60^\circ$  y el ciclobutano de  $90^\circ$ . El ciclopentano tiene un ángulo de  $108^\circ$ , por lo que su anillo es más estable debido a se aproxima al ángulo normal ( $109^\circ$ ). En el ciclohexano, el ángulo entre enlaces es de  $109.5^\circ$ , por lo que su anillo es más estable. En la Figura 9.29 se muestran los ejemplos más comunes de los alcanos de cadena cerrada.

Para nombrar a las cadenas de cicloalcanos con sustituyentes, se utilizan las mismas reglas de la IUPAC que se emplean para nombrar a los alcanos de cadena lineal. En este caso, se numeran a partir del nombre del sustituyente, respetando su nombre alfabéticamente. La numeración inicia desde el sustituyente. A continuación, se muestran en orden alfabético los sustituyentes más próximos al primero (Figura 9.30).

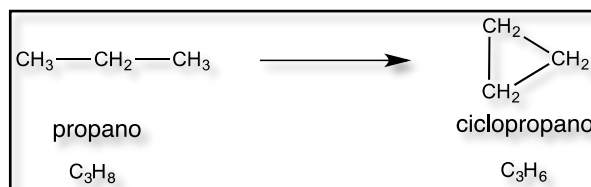


Figura 9.28. Substracción de dos hidrógenos del alcano para formar un cicloalcano.

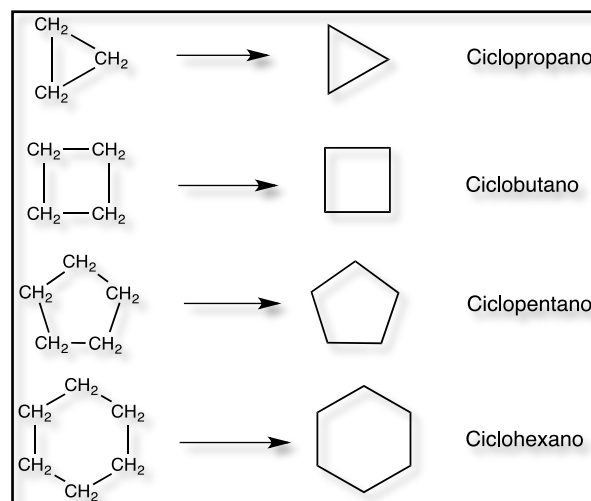


Figura 9.29. Ejemplos más comunes de los cicloalcanos.

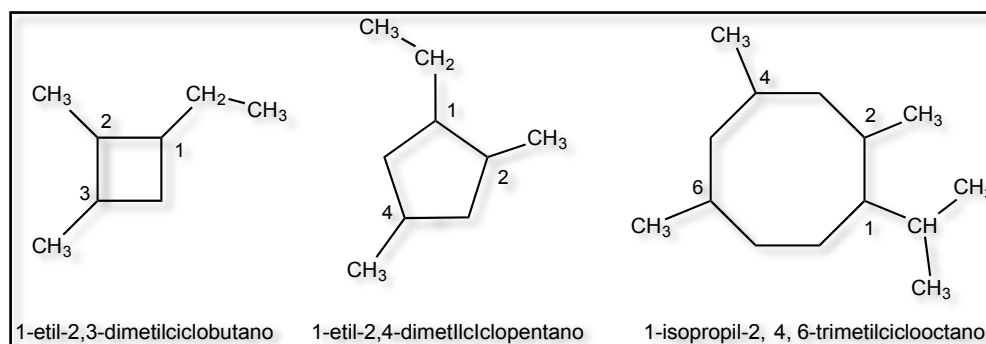


Figura 9.30. Ejemplos para nombrar cicloalcanos con sustituyentes.

## 9.4. Alquenos

Los *alquenos* son llamados comúnmente *olefinas*, en virtud de sus propiedades; especialmente el *eteno* por su factibilidad para producir óleos (del latín *óleum*, que se refiere a líquidos grasos). Los alquenos presentan una hibridación  $sp^2$ , los ángulos entre sus enlaces forman  $120^\circ$  y la unión entre los átomos de carbono tiene un enlace tipo sigma ( $\sigma$ ) y otro tipo pi ( $\pi$ ) (Figura 9.31).

### 9.4.1 Nomenclatura

Se siguen las mismas reglas de los alcanos para nombrar a los alquenos según la IUPAC: inicia con un prefijo numeral (met, et, but, prop, pent, etc.), seguido del sufijo "eno" empleado para indicar la presencia de un doble enlace. También se les conoce como hidrocarburos saturados. Su fórmula general es  $C_nH_{2n}$  (Figura 9.32).

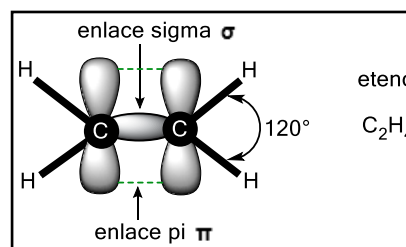
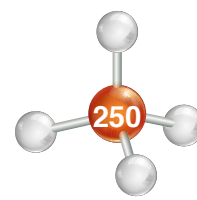


Figura 9.31. Estructura tridimensional del eteno.





Es muy fácil indicar el estado de agregación de los alquenos y, por ende, su propiedad física, conforme al número de átomos: los primeros tres compuestos (eteno, propeno, buteno) son gases a presión y a temperatura ambiente; los siguientes son líquidos y a partir de la molécula de dieciséis átomos de carbono, son sólidos.

### 9.4.2 Alquenos ramificados o derivados

Para nombrar a otros alquenos u olefinas de cadena larga, más complejos en su estructura, se cumplen las siguientes reglas de la IUPAC:

Una vez seleccionada la cadena continua más larga de átomos de carbono que contenga un doble enlace (Figura 9.33), se prosigue a:

1. Numerar por el extremo que quede más cerca al doble enlace. Por ejemplo, para el 3-etil-3-metil-1-hexeno se realiza lo siguiente (Figura 9.34):
2. Identificar los sustituyentes y la posición que ocupan en la cadena principal (Figura 9.35).
3. Para nombrar al compuesto, los sustituyentes se colocan en orden alfabético con el número que les corresponde en la cadena, separado por guiones y, por último, se coloca el número de la posición del doble enlace seguido del nombre que le corresponde al número de átomos de carbono de la cadena y la terminación "eno" (Figura 9.36).

Los siguientes son tres ejemplos ilustrativos de cómo nombrar un alqueno cuando la posición del doble enlace se encuentra en otra sección del compuesto. En estos casos se utiliza el número más pequeño que le corresponda en la numeración de la cadena (Figura 9.37):

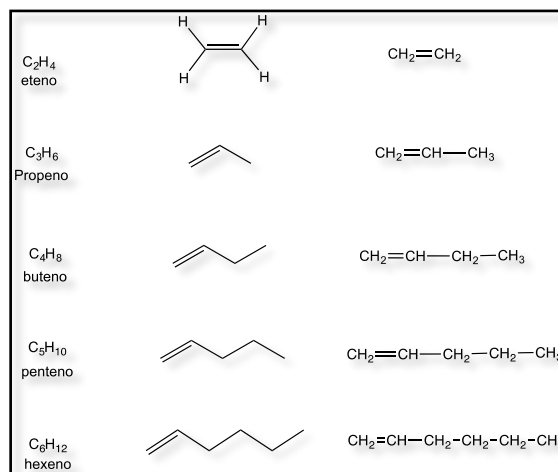


Figura 9.32. Ejemplos de los alquenos más comunes.

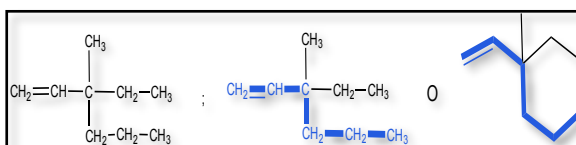


Figura 9.33. Selección de la cadena más larga del hidrocarburo que contenga doble enlace.

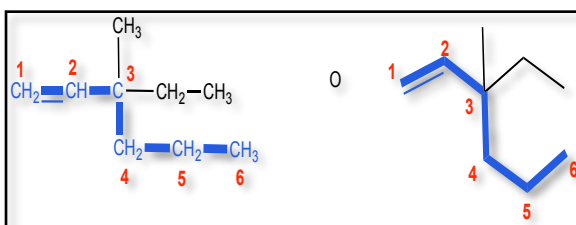


Figura 9.34. Primer paso para nombrar alquenos de cadena larga.

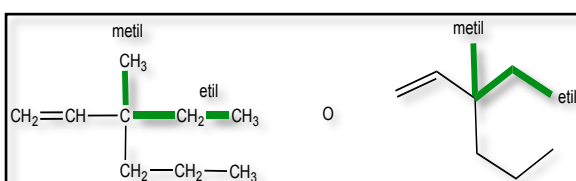


Figura 9.35. segundo paso para nombrar alquenos de cadena larga.

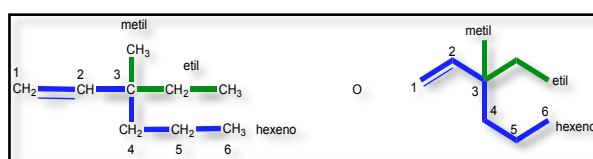


Figura 9.36. 3-etil-3-metil-1-hexeno.

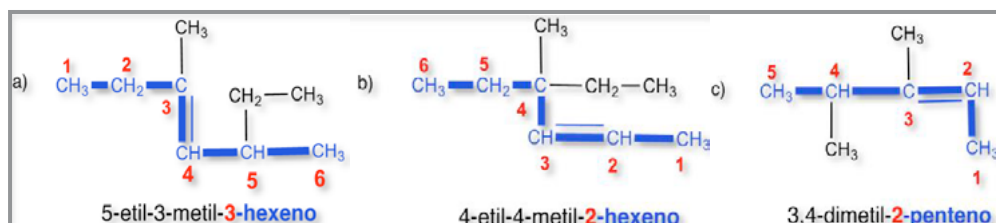


Figura 9.37. Ejemplos de alcanos con diferentes posiciones del doble enlace.



### 9.4.3 Estructura tridimensional

Una de las características más importantes dentro del doble enlace es su **hibridación  $sp^2$** , que representa la combinación del orbital  $s$  y  $2p$  como orbitales degenerados y un orbital  $p$  no hibrido, lo que permite explicar por qué se pueden representar tres enlaces simples o sigma ( $\sigma$ ) y un enlace pi ( $\pi$ ). La formación del enlace tipo pi con dos átomos de carbono se logra por el traslape lateral de los orbitales  $p$  no híbridos. En el caso de los tres enlaces  $\sigma$  que se forman para esta hibridación, el ángulo entre los enlaces es de  $120^\circ$  y no se toman en cuenta los lóbulos del enlace  $\pi$ . Los alquenos presentan una estructura plana, tal y como se observa a continuación (Figura 9.38).

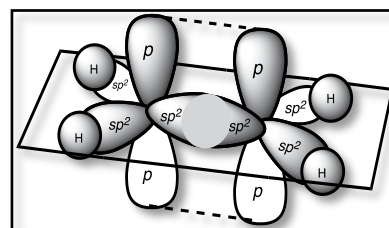


Figura 9.38 Estructura tridimensional del eteno.

### 9.4.4 Isomería geométrica

Otra consecuencia de la hibridación  $sp^2$ , en el caso de los alquenos, es la **isomería geométrica**: posición relativa de los sustituyentes de un doble enlace en relación misma con el doble enlace, como en el 2-buteno, un hidrocarburo de cuatro carbonos, en el que se puede marcar al doble enlace como el centro de la estructura y, como sustituyentes, a los dos metilos restantes. En este sistema es posible plantear dos estructuras geométricas: en una, los metilos se encuentran del mismo lado del doble enlace (**isomería  $Z$** ) y en la otra los metilos se encuentren en lados opuestos al doble enlace (**isomería  $E$** ), (Figura 9.39).

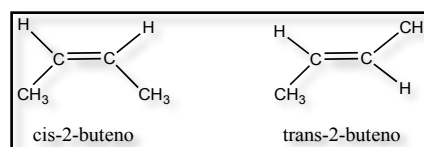


Figura 9.39. Estructura de los metilos.

### 9.4.5 Dienos y trienos

Cuando dentro de su estructura, un hidrocarburo presenta un doble enlace, se utiliza la terminación "**eno**" para nombrarlo; pero si tiene dos dobles enlaces se debe utilizar el sufijo o terminación "**dieno**"; si presenta tres dobles enlaces en la cadena, se utiliza la terminación "**trieno**", y así sucesivamente.

#### 9.4.5.1 Dienos

Las reglas empleadas para nombrar a los **dienos** son similares a las de los alquenos: primero se debe seleccionar la cadena más larga que contiene los dobles enlaces; luego los sustituyentes unidos a la cadena se numeran y se nombran al final, se designa a la cadena principal, iniciando con el número menor la posición de los dobles enlaces (Figura 9.40).

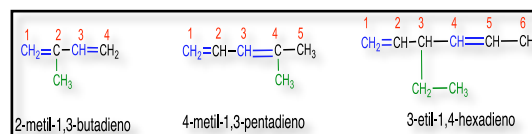


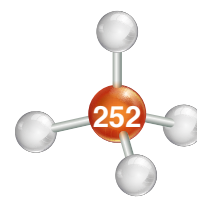
Figura 9.40. Ejemplos de dienos simples.

Los dienos pueden ser clasificados, a partir del arreglo de sus dobles enlaces, en **aislados (no conjugados)** y **conjugados**:

1. **Dienos aislados o no conjugados**: los dobles enlaces se encuentran separados por un carbono con hibridación  $sp^3$ . No existe movimiento de los electrones ni estructuras resonantes (Figura 9.41).



Figura 9.41. Ejemplos de dienos aislados, para una mejor representación se omitieron los enlaces con hidrógeno.







2. **Dienos conjugados:** los dos dobles enlaces se encuentran separados por un enlace sencillo. Todos los carbonos presentan una hibridación  $sp^2$ . Existe movimiento de sus electrones a través de sus enlaces y también hay presencia de estructuras resonantes (Figura 9.42).

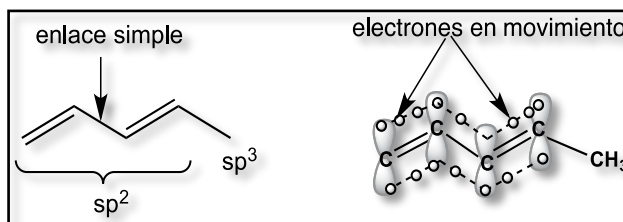


Figura 9.42. Ejemplos de dienos conjugados.

### 9.4.5.2 Trienos

Un hidrocarburo con tres dobles enlaces es conocido, genéricamente, como **trieno**. Para ser nombrados, se respetan las mismas indicaciones que en los dienos. Si un compuesto presenta tres dobles enlaces en las posiciones 1,3,5 y una cadena de seis carbonos es nombrado 1,3,5-hexatrieno (compuesto "a") o 1,3,6-heptatrieno (compuesto "b"), en su caso (Figura 9.43).

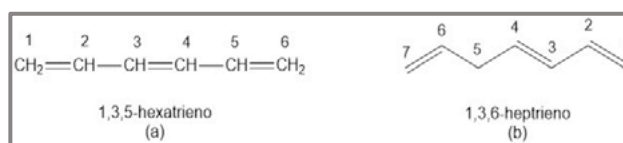


Figura 9.43. Ejemplos de trienos con tres dobles enlaces.

### 9.4.6 Radicales de alquenos

Al referirnos a los alquenos es muy difícil nombrar radicales; sin embargo, es posible reconocer dos grupos identificados con sus nombres comunes: el **grupo vinilo** y el **grupo alilo** (Figura 9.44).

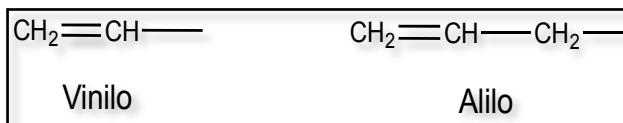


Figura 9.44. Grupos vinilo y alilo en los radicales alquenos.

### 9.4.7 Cicloalquenos

Los **cicloalquenos** son hidrocarburos insaturados de cadena cerrada que contienen al menos un doble enlace en su molécula. Su fórmula general es  $C_nH_{2n-2}$ . Esta fórmula sólo corresponde a ciclos con un doble enlace ya que también es válida para los alquinos (Figura 9.45).

Para nombrarlos se debe anteponer el prefijo **ciclo**, seguido del nombre del alqueno (propeno, buteno, penteno, etc.). Si el ciclo presenta un sustituyente, deberán ser consideradas las reglas descritas, indicando el número de la posición del carbono que contiene el doble enlace. Para numerar el cicloalqueno, la prioridad es el doble enlace, por lo que se comienza desde el doble enlace que tenga el número más pequeño (Figura 9.46)

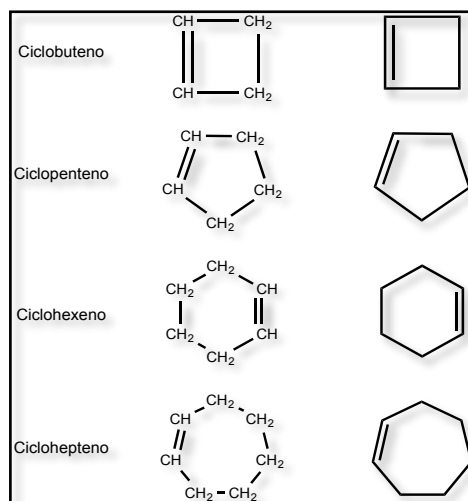


Figura 9.45 Ejemplos comunes de los cicloalquenos.

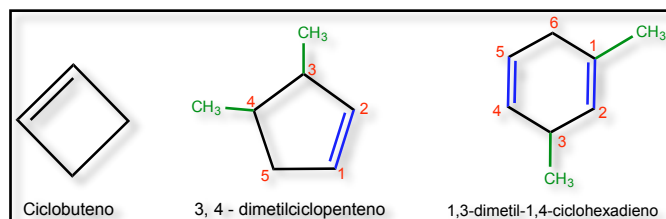


Figura 9.46. Ejemplos representativos de los cicloalquenos.





## 9.5 Alquinos

Los **alquinos** son compuestos insaturados alifáticos, con moléculas lineales que presentan una hibridación  $sp$  formando  $180^\circ$  entre sus enlaces; la unión entre los carbonos se caracteriza por un enlace tipo sigma ( $\sigma$ ) y dos enlaces pi ( $\pi$ ) (Figura 9.47); su fórmula general es  $C_nH_{2n-2}$ . La molécula más simple de los alquinos es el **etino** o mejor conocido como **acetileno**, el cual contiene dos átomos de carbono que al sustituirse en la fórmula general, da como resultado  $C_2H_{2(2)-2} = C_2H_2$ .

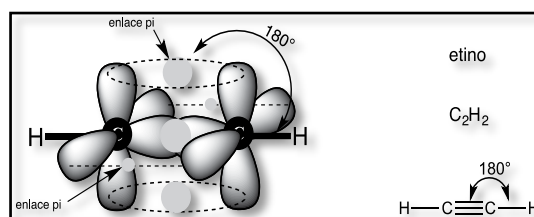


Figura 9.47. Unión entre los carbonos caracterizada por un enlace tipo sigma ( $\sigma$ ) y dos enlaces pi ( $\pi$ ).

### 9.5.1 Nomenclatura

Para este efecto, son aplicadas las mismas reglas que rigen a los alcanos y alquenos, establecidas por la IUPAC, en el siguiente orden:

1. Identificar y numerar la cadena principal del extremo donde se encuentre más cercano el triple enlace, nombrando a la cadena principal con los prefijos numerales et, prop, but, según corresponda, seguido por la terminación **ino**, que indica la presencia de un triple enlace, como el caso del heptino (Figura 9.48).
2. Identificar y nombrar a los sustituyentes (Figura 9.49).
3. Asignar el número de la posición de cada sustituyente (Figura 9.50).
4. Unir los nombres, respetando el orden alfabético (Figura 9.51).

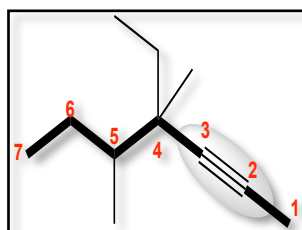


Figura 9.48. Cadena principal del Heptino.

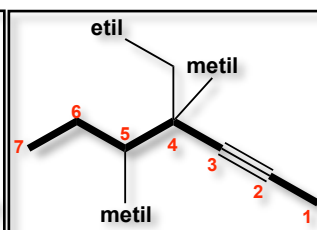


Figura 9.49. Sustituyentes de los alquinos.

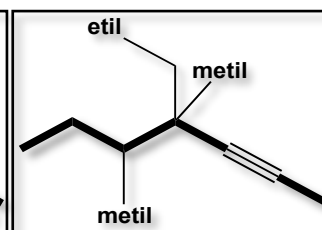


Figura 9.50. Posición de los sustituyentes de los alquinos.

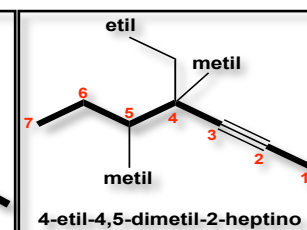


Figura 9.51. Nombre de un tipo representativo de los alquinos.

La Figura 9.52 contiene la fórmula molecular, la fórmula desarrollada y la fórmula semidesarrollada de los alquinos más comunes.

Los tres primeros (etino, propino, butino) son gaseosos a presión y a temperatura ambiente; del pentano al compuesto de quince átomos de carbono corresponden a los alquinos líquidos y desde la molécula de dieciséis átomos de carbono en adelante, son sólidos.

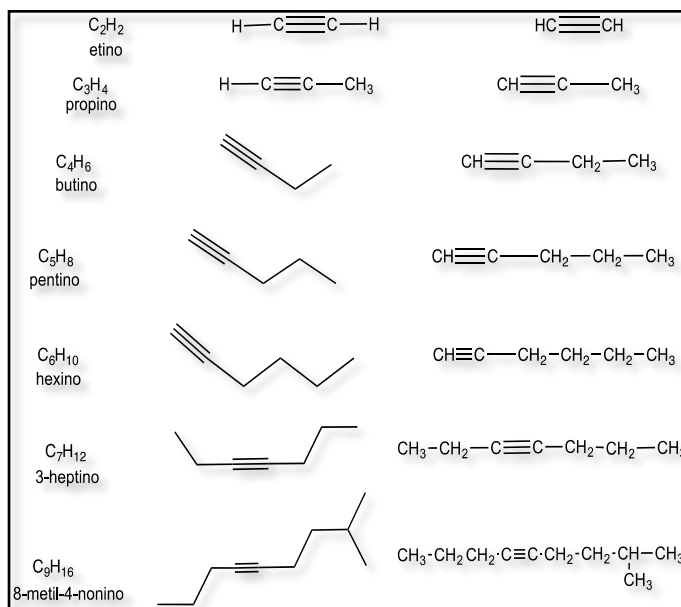


Figura 9.52. Ejemplos de los alquinos más simples.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

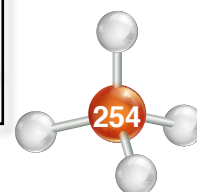
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





### 9.5.2 Estructura tridimensional

La característica más destacada del triple enlace del alquino es su hibridación  $sp$  o lineal, puesto que la combinación entre sus enlaces  $s$  y  $p$  dan como resultado dos orbitales híbridos  $sp$  sigma ( $\sigma$ ) y dos orbitales no hibridados  $p$  que forman enlaces pi ( $\pi$ ); estos orbitales formarán un traslape lateral, lo que permite explicar por qué los alquinos tienen un ángulo de  $180^\circ$  y su forma lineal, mientras que los orbitales  $2p$  no hibridados formarán el triple enlace. Para mayor estabilidad, su estructura se acomoda de manera lateral como se puede observar en la estructura tridimensional de la Figura 9.53.

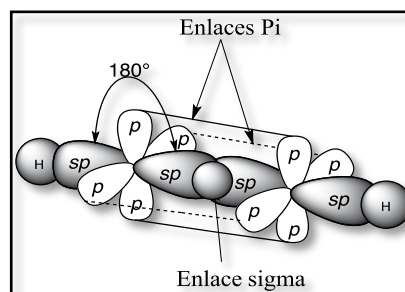


Figura 9.53. Estructura tridimensional de los alquinos.

## 9.6 Principales grupos funcionales en la química orgánica, nomenclatura y propiedades

### 9.6.1 Clasificación de los grupos funcionales

Un *grupo funcional* es una entidad compuesta por la combinación de uno o varios átomos diferentes al carbono e hidrógeno, denominados heteroátomos, los cuales presentan distintas propiedades físicas y químicas, dependiendo de su arreglo o unión (enlaces sencillos, dobles o triples) a cada cadena hidrocarbonada.

Para nombrarlos, también se deben atender las reglas generales de la Unión internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC). La primera clasificación está en función del heteroátomo presente en el hidrocarburo. Por ejemplo, los compuestos con oxígeno, nitrógeno, halógenos y azufre. Esta clasificación no es absoluta puesto que existen grupos funcionales que presentan dos heteroátomos o más, incrementando su número (Figura 9.54).

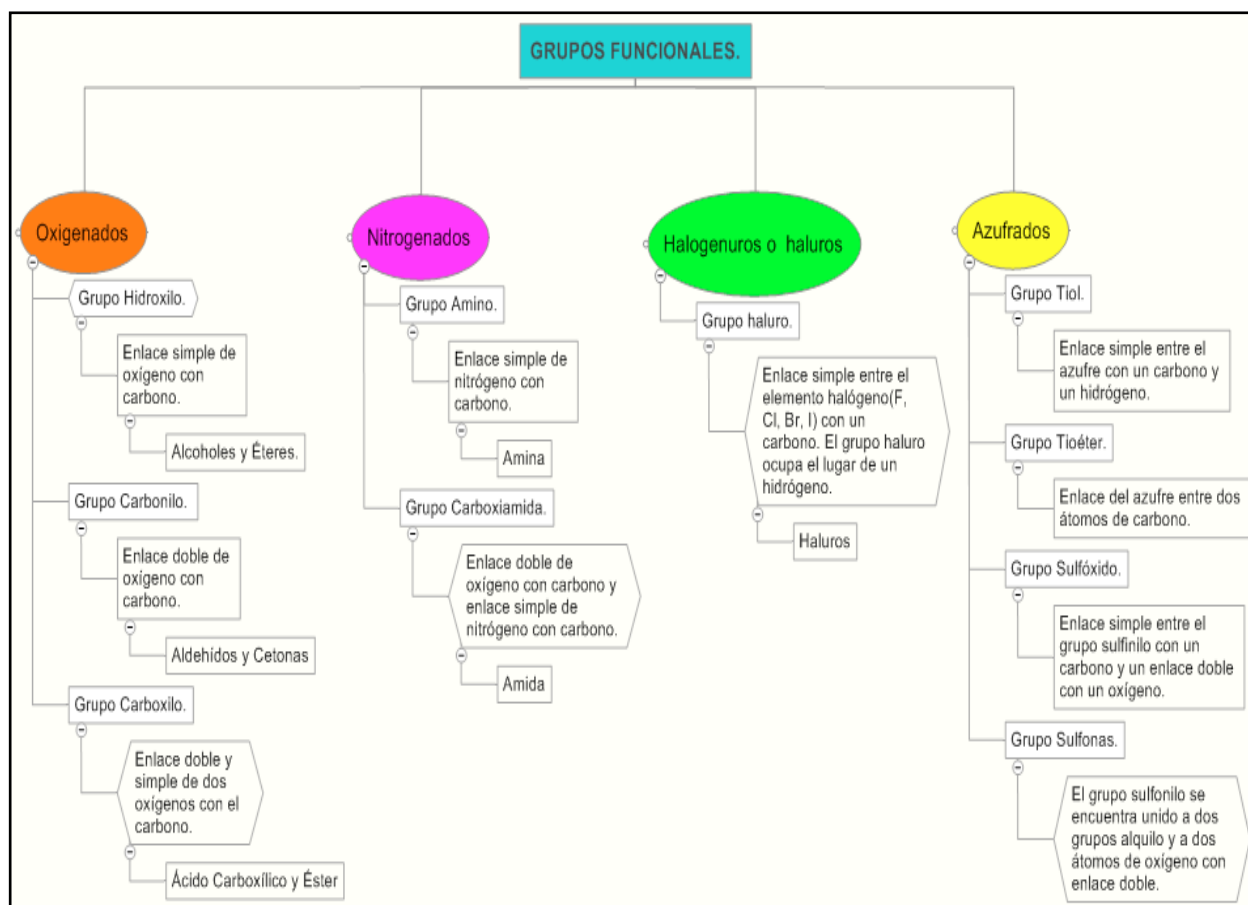


Figura 9.54. Clasificación de los grupos funcionales por elemento.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22



## 9.6.2 Alcoholes (grupo hidroxilo)

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

Los *alcoholes* son compuestos orgánicos cuya característica más importante es la sustitución de uno de los hidrógenos de un hidrocarburo por un hidroxilo (-OH). El radical hidroxilo puede provenir de diversas fuentes, una de las cuales es la disociación del agua (H<sub>2</sub>O) en la que uno de los átomos del hidrógeno rompe su enlace con el oxígeno. Este proceso genera el radical hidroxilo (-OH). Para resaltar la importancia del grupo funcional alcohol, es necesario citar a las fuerzas intermoleculares en las que, debido a sus propias características, el agua puede formar interacciones dipolo-dipolo (Figura 9.55) que en su conjunto y para este caso específico se llaman interacciones de *punte de hidrógeno*. Estas interacciones resultan extremadamente importantes ya que modifican las características físicas y químicas del agua, como su punto de ebullición, 100 °C, y su capacidad para disociar sales; ambas características únicas: aunque existen otras moléculas similares, como el ácido sulfhídrico (H<sub>2</sub>S), no poseen las mismas propiedades ni la misma abundancia en la naturaleza.

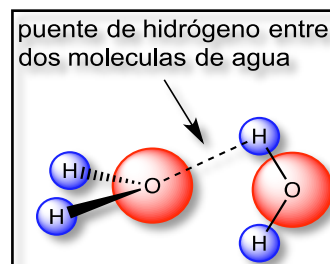


Figura 9.55. Interacciones de puente de hidrógeno.

La Figura 9.56 ilustra el proceso de sustitución de un hidrógeno por el radical hidroxilo y la transformación de la molécula de un alcano en un alcohol. La presencia del

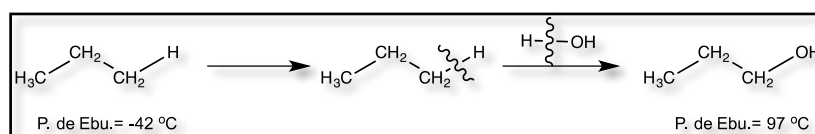


Figura 9.56. Estructura del propano y del propanol.

grupo hidroxilo modifica completamente las características físicas y químicas de los hidrocarburos, debido a que aparecen *interacciones puente de hidrógeno* en donde antes sólo existían interacciones de Van der Waals o London (dispersión). Los hidrocarburos incrementan sus puntos de fusión y de ebullición, tal como se observa en el caso del propano y el propanol. Ambos compuestos presentan el mismo número de carbonos; no obstante, el alcano tiene un punto de ebullición de -42 °C y su correspondiente alcohol ebulle a 97 °C. El fenómeno químico que se diferencia por completo en los alcoholes es su reactividad: el oxígeno es un átomo electronegativo capaz de deformar las nubes electrónicas de los compuestos permitiendo el ataque de los reactivos a cadenas hidrocarbonadas, además de que presenta pares de electrones libres que pueden atacar a otro compuesto. Estos procesos no ocurren en los alcanos. El uso industrial de los alcoholes es diverso y muy importante en todos los órdenes de la vida social y económica.

Se enfocará la disertación en su uso medicinal, como desinfectante y como producto de consumo al ser componentes de bebidas añejadas como el ron, el tequila, el whisky, etc. Asimismo, se citan usos generales de los otros alcoholes: removedores de impurezas, aditivos en anticongelantes, lubricantes, plastificantes, estabilizantes o desengrasantes (Figura 9.57).

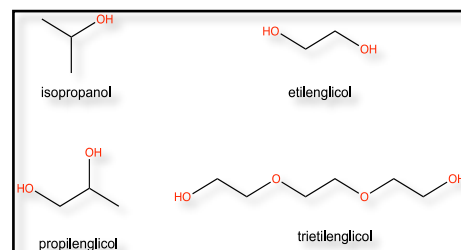


Figura 9.57. Ejemplos de alcoholes de uso comercial.

### 9.6.2.1 Nomenclatura

El número de carbonos determina el nombre de la cadena principal de los hidrocarburos. Al tratarse de los alcoholes el prefijo se mantiene, pero cambia su terminación: “*ol*” en vez de “*ano*”. Alcanos como el etano o el butano, cuando son alcoholes se llaman etanol o butanol (Tabla 9.3).

Si el grupo *hidroxi* no se encuentra en el carbono uno del hidrocarburo, es necesario indicar en qué carbono se localiza. En la Tabla 9.4 se pueden observar al menos dos estructuras (**b** y **c**) en las



que el grupo hidroxilo no se encuentra en la posición uno. Para indicar dónde se localiza este OH se debe colocar el número de su posición en la cadena hidrocarbonada. Dentro de los compuestos **d**, **e** y **f** de la misma molécula se encuentran dos o, incluso, tres grupos hidroxilo. Para nombrar estos compuestos, conocidos como *glicoles*, se mantiene como prefijo el número de carbonos y, antes del sufijo "ol", colocar di o tri. Además, se debe indicar el número del carbono en donde se encuentra el grupo alcohol.

Nomenclatura de alcoholes			
Alcano	Estructura	IUPAC	Estructura
Metano	CH <sub>4</sub>	Metanol	CH <sub>3</sub> OH
Etano	CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	Etanol	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH
Propano	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	Propanol	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OH
Butano	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	Butanol	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OH
Pentano	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	Pentanol	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OH

Tabla 9.3. Alcoholes comunes.

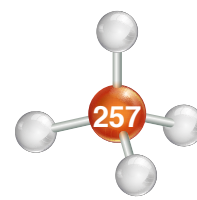
	Fórmula	Nombre	Clasificación
(a)		1-propanol	alcohol
(b)		3-pentanol	alcohol
(c)		4-heptanol	alcohol
(d)		1,2-etanodiol	diol, glicol
(e)		1,2-propanodiol (propilenglicol)	diol, glicol
(f)		1,2,3-propanotriol (glicerina)	triol, glicol

Tabla 9.4. Compuestos mono y polihidroxilados.

En el mismo grupo funcional existe una segunda clasificación que hace referencia al número de protones presentes en el carbono que soporta el grupo hidroxilo: si el carbono presenta dos hidrógenos, se denomina *alcohol primario*, si solo se presenta un hidrógeno es *alcohol secundario* y si no presenta hidrógenos es un *alcohol terciario* (Tabla 9.5).

Tipo de alcohol	Estructura	Ejemplo
Alcohol primario	$\begin{array}{c} \text{R} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\   \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\   \\ \text{H} \end{array}$
Alcohol secundario	$\begin{array}{c} \text{R} \\   \\ \text{R}-\text{C}-\text{OH} \\   \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{OH} \\   \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{CH}_3 \\   \\ \text{H} \end{array}$
Alcohol terciario	$\begin{array}{c} \text{R} \\   \\ \text{R}-\text{C}-\text{OH} \\   \\ \text{R} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{OH} \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$

Tabla 9.5. Alcoholes primarios, secundarios y terciarios.





### 9.6.2.2 Aplicaciones de los alcoholes en Ciencias de la Tierra

Aparte de algunas aplicaciones de los alcoholes en un contexto general, en este capítulo se mostrará un ejemplo específico de su importancia en la ingeniería. Al evaluar la madurez de un kerógeno, se realiza el estudio de la *vitrinita*, la cual se encuentra dentro de las rocas, y es una sustancia formada por la alteración térmica de la lignina y la celulosa; ambas sustancias, por su composición química, son compuestos polihidroxilados, es decir alcoholes (Figura 9.58).

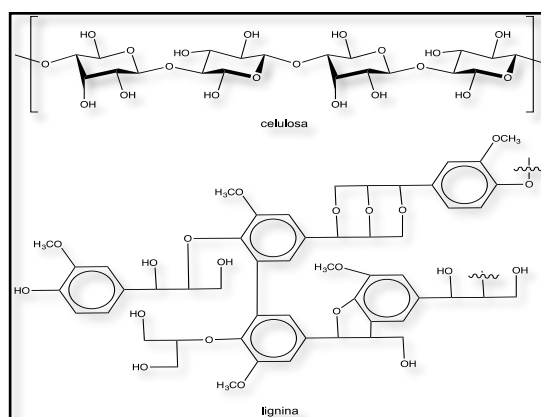


Figura 9.58. Estructuras de celulosa y lignina, componentes de la *vitrinita*.

### 9.6.3 Éteres

Los *éteres* son compuestos muy similares a los alcanos por sus características físicas: poseen puntos de ebullición ligeramente más altos o incluso similares, como en el caso del propano (-42 °C) y el dimetil-éter (-24 °C) o el pentano (36 °C) y el dietil-éter (34.6 °C). Donde difieren mucho en el *momento dipolar*, debido a la presencia de oxígeno, los éteres registran una polaridad muy baja, mientras que los alcanos no presentan momento dipolar, son insolubles en agua (*compuestos hidrofóbicos*) y su densidad es menor al agua. Sus usos varían: pueden ser empleados como disolvente orgánico (dietil-éter, tetrahidrofurano, THF), como líquido calefactor (difenil-éter), por su alto punto de ebullición, como anestésico (metil-propil-éter) e inclusive, en su forma polimérica, como componente en la industria cosmética (glicol-polietileno, conocido como poliéter).

#### 9.6.3.1 Nomenclatura

Los éteres tienen como base una estructura general R-O-R', en donde R y R' se refieren a radicales hidrocarbonados alifáticos o aromáticos. Son nombrados considerando a los radicales como sustituyentes y se escriben en orden alfabético (Figura 9.59). Es posible encontrar éteres con el mismo radical. Para nombrar a estos compuestos (*éteres simétricos*) se utiliza un prefijo numérico y el nombre del radical (Tabla 9.6).

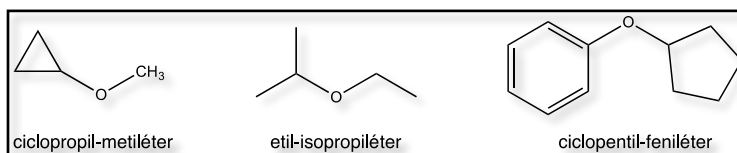
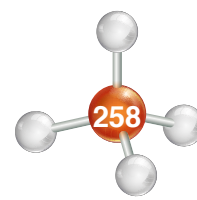


Figura 9.59. Ejemplos de éteres simples.

Radical	Estructura	Nombre	Estructura
Etil	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	dietiléter	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>
Propano	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -	dipropiléter	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> H <sub>3</sub>
Butil	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -	dibutiléter	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>
Benceno	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> -	difeniléter	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>

Tabla 9.6. Éteres simétricos.







### 9.6.3.2 Uso de los éteres en Ciencias de la Tierra

Los éteres son utilizados, primordialmente, como aditivo en las gasolinas, donde operan como antidetonantes. Anteriormente, para asegurar una buena combustión se agregaba tetraetilo de plomo; sin embargo, debido a que este es un compuesto muy peligroso por la liberación de plomo al ambiente se sustituyó por un éter que presenta la misma actividad sin el problema de toxicidad metálica. El éter que se usa actualmente es el metil-terbutiléter (Figura 9.60) comúnmente conocido como MTBE.

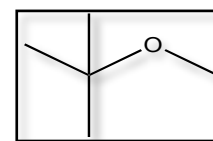


Figura 9.60. Estructura del MTBE.

Otra aplicación muy importante ocurre en la industria extractiva debido a su insolubilidad con el agua y a que es capaz de disolver sustancias orgánicas empleadas en los procesos de flotación para la extracción de metales.

### 9.6.4 Aldehídos

El *grupo funcional aldehído*, así como las cetonas, son compuestos que contienen al grupo carbonilo, unidad caracterizada por la presencia de un átomo de oxígeno unido a uno de carbono formando un doble enlace (enlace tipo  $\sigma$  y  $\pi$ ). Dejan libres dos valencias en el átomo de carbono para unirse a distintas cadenas hidrocarbonadas. En el caso específico de los aldehídos, una de las valencias está unida a un hidrógeno (Figura 9.61)

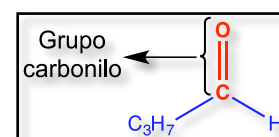


Figura 9.61. Ejemplo de un aldehído resaltando el grupo carbonílico.

Los aldehídos presentan una tendencia muy similar a los alcanos: conforme aumenta el número de átomos de carbono, aumenta sus puntos de ebullición; pero debido a la presencia de oxígeno, por ser un heteroátomo más voluminoso, y a los pares de electrones libres que presenta la molécula, que se denomina *impedimento estérico*, no permiten que existan interacciones intermoleculares. Esto provoca que los valores del punto de ebullición disminuyan más que en el caso de los alcanos a causa de la presencia misma de oxígeno. Estos compuestos son polares y por ello los aldehídos pequeños pueden ser solubles en agua, mientras que al aumentar el número de carbonos se pierde esta característica en razón, principalmente, del incremento de la parte hidrofóbica de la molécula (Figura 9.62). Los aldehídos son compuestos utilizados en diversas áreas de la vida cotidiana, como el formol, que es el nombre comercial del metanaldehído, usado ampliamente en medicina para la conservación de tejidos muertos, como bactericida, como componente básico en la producción de perfumes y tintes, como pesticidas y en diversos compuestos farmacéuticos.

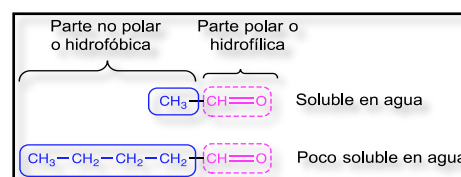


Figura 9.62. Ejemplo de dos aldehídos de acuerdo con su solubilidad en agua.

#### 9.6.4.1 Nomenclatura

La manera como se nombra a los compuestos con este grupo funcional es muy sencilla, en virtud de que el grupo carbonilo, para tener un hidrógeno unido, debe estar en los extremos de las cadenas de los hidrocarburos, a menos de que se encuentre como sustituyente. Para nombrar a un aldehído se utiliza el nombre del alcano correspondiente sustituyendo la "o" terminal por "al". Por ejemplo, el hidrocarburo de seis átomos de carbono llamado hexano, como aldehído es llamado hexanal (Tabla 9.7). La Figura 9.63 muestra las estructuras correspondientes.

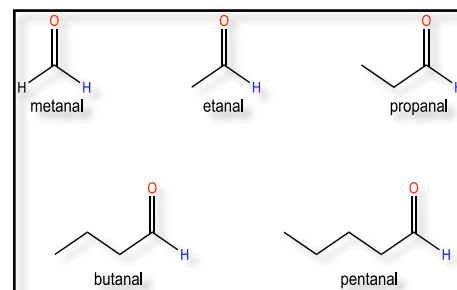


Figura 9.63. Estructuras de aldehídos.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

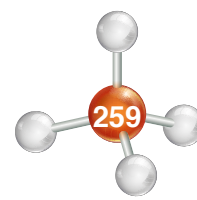
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





Alcano	Estructura	Compuesto	Estructura
Metano	CH <sub>4</sub>	Metanal	HCHO
Etano	CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	Etanal	CH <sub>3</sub> CHO
Propano	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	Propanal	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CHO
Butano	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	Butanal	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CHO
Pentano	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	Pentanal	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CHO

Tabla 9.7. Ejemplos de aldehídos simples.

### 9.6.4.2 Usos de los aldehídos en Ciencias de la Tierra

En Ciencias de la Tierra son escasos los casos en los que se encuentran aldehídos estables; sin embargo, se pueden encontrar dentro de los carbohidratos cuando se hacen estudios del contenido de materia orgánica en los suelos; en la industria son compuestos muy usados como disolventes o como aditivos en la síntesis de plásticos. Los aldehídos más comúnmente empleados en la industria del plástico son el formaldehído, el furfural y la acroleína (Figura 9.64).

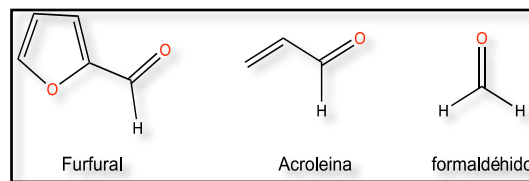


Figura 9.64. Aldehídos usados en plásticos.

### 9.6.5 Cetonas

En las *cetonas*, a diferencia de los aldehídos, ambas valencias del grupo carbonilo son sustituidas por *hidrocarburos alifáticos*, y/o *hidrocarburos aromáticos*. Son compuestos polares y que presentan puntos de ebullición más altos que los alcanos, pero menores que los alcoholes.

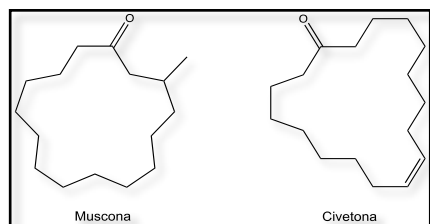


Figura 9.65. Cetonas cíclicas usadas en la industria del perfume.

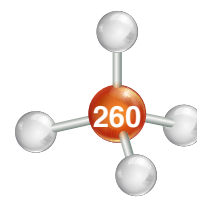
Cotidiana o industrialmente, las cetonas son utilizadas como disolvente de esmaltes (acetona o propanona), así como para obtener productos químicos derivados, como la 2-butanona (disolvente de lacas, resinas o aceites), como plastificante del nitrato de celulosa, como repelente de la polilla, como sustancia antimicrobiana en procedimientos dentales y como aditivo en la industria del perfume (muscona o civetona, cetonas cíclicas) (Figura 9.65).

#### 9.6.5.1 Nomenclatura

La manera correcta de nombrar a los compuestos del *grupo carbonilo*, que presenta en sus dos valencias compuestos hidrocarbonados, respeta las mismas reglas que para nombrar a los alcanos: se debe utilizar también el prefijo numérico (met, pent, non, etc.). La diferencia radica en que se debe de indicar en qué carbono está el grupo carbonilo y usar la terminación "ona". En la Tabla 9.8 aparecen algunos ejemplos, junto a sus homólogos alcanos y en la Figura 9.66 se pueden observar sus correspondientes estructuras.

Sustancia homóloga		Cetona	
Alcano	Estructura	Nombre	Estructura
Propano	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	2-propanona	CH <sub>3</sub> COCH <sub>3</sub>
Butano	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	2-butanona	CH <sub>3</sub> COCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>
Pentano	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	2-pentanona	CH <sub>3</sub> COCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>
Hexano	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	3-hexanona	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> COCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>

Tabla 9.8. Nomenclatura común para nombrar cetonas de acuerdo a la IUPAC.





En otra nomenclatura muy usada para cetonas, aún cuando no es recomendada por la IUPAC, es donde las valencias complementarias al sistema carbonílico son consideradas como sustituyentes. Por ejemplo, la 2-butanona puede ser nombrada etil-metilcetona. Es importante recordar que los sustituyentes deben ser colocados en orden alfabético (Figura 9.67).

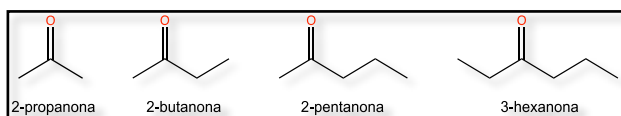


Figura 9.66. Estructura de cetonas.

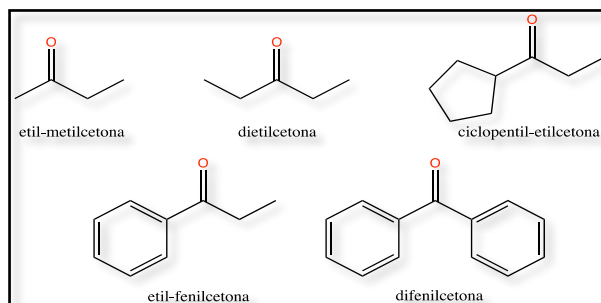


Figura 9.67. Estructuras de cetonas con una nomenclatura alterna.

### 9.6.5.2 Usos de las cetonas en Ciencias de la Tierra

En el estudio de sedimentos marinos para determinar las condiciones oceanográficas del pasado, se ha encontrado una relación entre la temperatura del mar en tiempos geológicos pretéritos con la presencia de cetonas de cadena muy larga que presentan, además, insaturaciones. Este tipo de sustancias es denominado, genéricamente, *alquenonas*.

En la Figura 9.68 se pueden observar algunas cetonas con las que se ha determinado las paleotemperaturas de los océanos. Estas moléculas orgánicas se extraen por diálisis ácida a partir de estructuras silíceas de radiolarios.

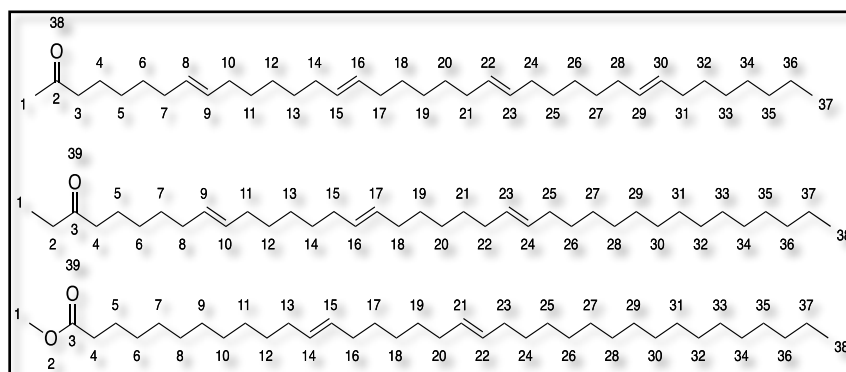


Figura 9.68. Ejemplos de alquenona.

### 9.6.6 Ácidos Carboxílicos

Los ácidos orgánicos pertenecen a la combinación de dos grupos funcionales: el grupo carbonílico y el grupo alcohol. Los *ácidos carboxílicos* son conocidos desde la antigüedad, por lo que muchos de ellos tienen un nombre común (Figura 9.69).

Este grupo funcional, por la presencia del grupo carbonilo y del alcohol, incluye compuestos polares en los que, como en los alcoholes, es factible formar enlaces tipo puente de hidrógeno. Esto explica por qué son compuestos con mayores puntos de ebullición y por qué muchos de ellos son solubles en disolventes polares.

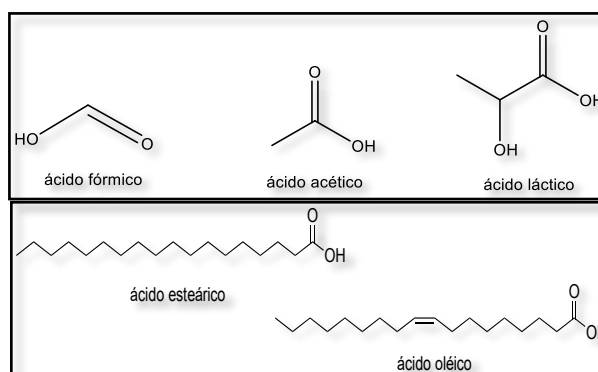


Figura 9.69. Ácidos orgánicos con nombres comunes.



Este grupo funcional, por la presencia del grupo carbonilo y del alcohol, incluye compuestos polares en los que, como en los alcoholes, es factible formar enlaces tipo puente de hidrógeno. Esto explica por qué son compuestos con mayores puntos de ebullición y por qué muchos de ellos son solubles en disolventes polares. Esta última cualidad debe de ser considerada cuidadosamente, ya que, al tener cadenas muy largas, como los aldehídos, se convierten en compuestos hidrofóbicos. Su uso como conservador de alimentos (ácido benzoico) es uno de los más frecuentes (Figura 9.70).

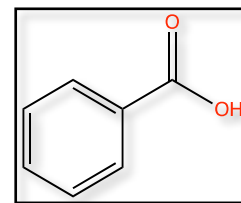


Figura 9.70. Estructura del ácido benzoico.

### 9.6.6.1 Nomenclatura

Para nombrar a estas sustancias utilizamos la palabra “ácido” seguida del nombre del hidrocarburo. En este caso, el nombre del alcano correspondiente en el que es sustituida la terminación “ano” por la declinación “oico”. Si tenemos un hidrocarburo con cuatro carbonos, que en los alcanos se llama butano, se llamará ácido butanoico. En la Tabla 9.9 se muestran algunos ejemplos de estos ácidos, mientras que en la Figura 9.71 se indican algunos ejemplos de ácidos carboxílicos.

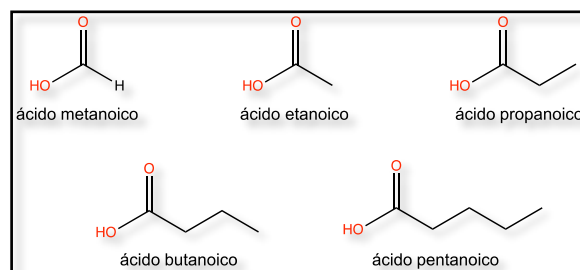


Figura 9.71. Estructura de los ácidos orgánicos.

Alcano	Estructura	Ácido	Estructura
Metano	CH <sub>4</sub>	Metanoico	HCOOH
Etano	CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	Etanoico	CH <sub>3</sub> COOH
Propano	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	Propanoico	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> COOH
Butano	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	Butanoico	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> COOH
Pentano	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	Pentanoico	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> COOH

Tabla 9.9. Ácidos carboxílicos.

### 9.6.6.2 Usos de los ácidos carboxílicos en Ciencias de la Tierra

Un uso directo de estos compuestos no es común en el área de la ingeniería ni en Ciencias de la Tierra. Sin embargo, como son sustancias existentes dentro de la materia orgánica, identificarlas y comprenderlas es importante para describir la composición del suelo y, en el caso de la formación de petróleo, prever el tipo de hidrocarburos que es factible encontrar.

### 9.6.7 Ésteres

El grupo funcional *éster* es muy parecido al de los ácidos carboxílicos. La diferencia resulta en el grupo hidroxilo, donde el hidrógeno ácido es sustituido por un radical *alquilo* o *arilo*. Una propiedad inequívoca de este grupo funcional, a diferencia de los otros, consiste en que todos sus compuestos presentan aroma; por ello son tan importantes para la industria en la que son aplicados como esencia de alimentos, dulces y bebidas. Citamos el metanoato de etilo (ron), el etanoato de isobutilo (plátano), el butanoato de metilo (manzana), el butanoato de etilo (piña), el butanoato de isopentilo (pera), entre muchos más (Figura 9.72). Estos compuestos presentan una polaridad más alta que los alcanos, pero menor a los ácidos. Sus puntos de ebullición también son menores.

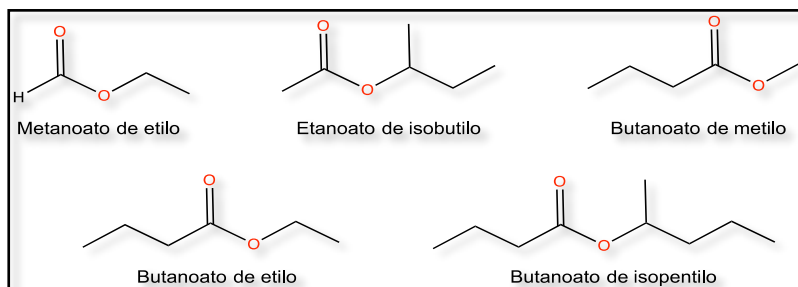


Figura 9.72. Ésteres con aroma característico usados en la industria

### 9.6.7.1 Nomenclatura

Al igual que una sal inorgánica, para nombrar a los ésteres se debe colocar primero el anión y después el catión. Por ejemplo, la sal NaCl es leída como cloruro de sodio. Sus nombres constan de dos partes: la primera proviene del ácido que lo origina, al cual se debe cambiar la terminación “oico” por “ato”, seguido del radical hidrocarbonado que sustituya al hidrógeno del ácido. Un ejemplo es el ácido benzoico, que, al sustituir el protón ácido por un etilo para generar el éster, se llamaría benzoato de etilo (Figura 9.73). La Tabla 9.10 presenta otros ejemplos de cómo nombrar ésteres.

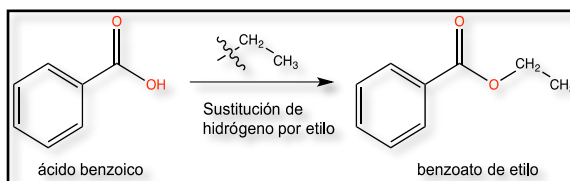


Figura 9.73. Cambio de un ácido a éster.

Ácido	Estructura	Compuesto	Éster
Metanoico		Metanoato de metilo	
Etanoico		Etanoato de metilo	
Propanoico		Propanoato de metilo	
Butanoico		Butanoato de metilo	
Pentanoico		Pentanoato de metilo	

Tabla 9.10. Ejemplos de ésteres y ácidos de donde provienen.

### 9.6.7.2 Usos de los ésteres en Ciencias de la Tierra

Los ésteres de baja masa molecular son empleados en la industria y en la ingeniería como disolventes de diversas sustancias orgánicas. Por ejemplo, el butanoato de etilo es disolvente de barnices y lacas que pueden ser usados como agentes protectores de tuberías, contenedores o equipos para evitar corrosión.





### 9.6.8 Aminas

Las **aminas** son hidrocarburos unidos a átomos de nitrógeno. Como poseen tres valencias y un par de electrones libres pueden ser parte de diferentes compuestos y, en su caso, reaccionar con otra sustancia y/o presentarse como una sal. Debido al par de electrones, las aminas se consideran bases de Lewis o bases de Brønsted-Lowry. Sus compuestos son polares y presentan interacciones intermoleculares tipo puente de hidrógeno.

#### 9.6.8.1 Nomenclatura

Nombrar a los compuestos con nitrógeno es muy sencillo. Basta con indicar el nombre del radical hidrocarbonado, seguido del sufijo "**amina**". Por ejemplo: etilamina. Como el nitrógeno presenta tres valencias, se pueden colocar hasta tres radicales iguales o distintos; en caso de que sean iguales sólo se debe agregar un prefijo numeral. Por ejemplo: trimetilamina o trietilamina. Si los radicales son distintos, deben ser nombrados en orden alfabético. Por ejemplo: etil-metilamina, di-isopropil-metilamina, butil-etil-metilamina.

El último tipo de aminas conocido es el de las llamadas **sales cuaternarias de amonio**, en las cuales, después de tener una amina trisustituida, el par electrónico del nitrógeno se une a otro radical formando una sal. Un ejemplo es el bromuro de tetrametilamonio (Figura 9.74).

Dependiendo del número de hidrógenos unidos al nitrógeno, se categoriza como un tipo de amina. Si la amina presenta dos hidrógenos ( $\text{CH}_3\text{-NH}_2$ ), se cataloga como una **amina primaria**; si la amina sólo presenta un hidrógeno ( $\text{CH}_3\text{-NH-CH}_3$ ), es denominada **amina secundaria** y, si no hay hidrógenos [ $(\text{CH}_3)_3\text{N}$ ], se cataloga como **amina terciaria** (Figura 9.75).

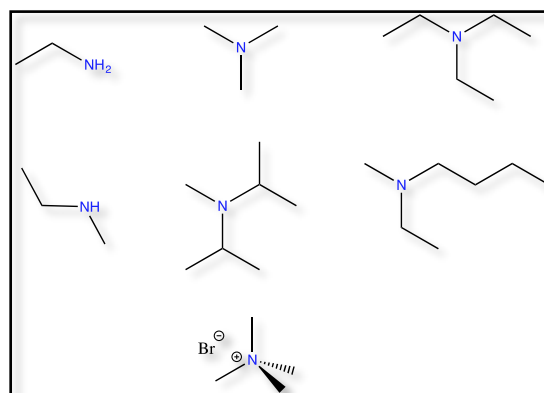


Figura 9.74. Diferentes tipos de aminas

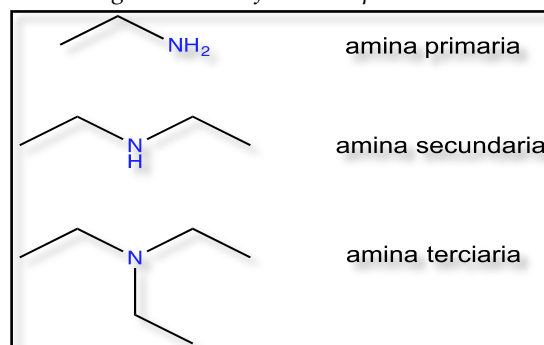


Figura 9.75. Tipos de aminas.

#### 9.6.8.2 Usos de las aminas en Ciencias de la Tierra

Los compuestos nitrogenados orgánicos son relevantes en distintas áreas de las Ciencias de la Tierra. Por ejemplo, los pesticidas nitrogenados son compuestos que, en grandes cantidades, mejoran la producción agrícola. Su uso, sin embargo, ha provocado alteraciones en los suelos debido a la persistencia de estos pesticidas: en las plantas que crecen en esos campos, ha generado problemas de contaminación. De ahí la importancia de identificar su estructura y, en caso de descomposición de los metabolitos que se generan. De este modo es posible determinar el grado de afectación a los suelos y a los seres vivos (Figura 9.76).

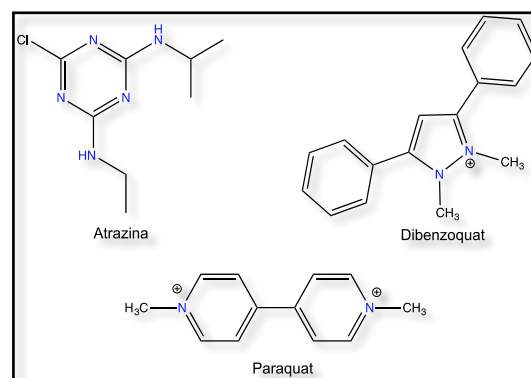


Figura 9.76. Pesticidas orgánicos



## 9.6.9 Amidas

Las **amidas** son un grupo funcional que combina al grupo carbonilo con el amino. Sus características físicas son muy específicas debido a que son compuestos muy polares y de altos puntos de fusión y ebullición (exceptuando la metanamida, que es líquida a temperatura ambiente). Siempre y cuando la parte nitrogenada de la amida presente hidrógenos, puede formar interacciones tipo puente de hidrógeno. Las moléculas pequeñas, menores a seis carbonos, son solubles en agua.

### 9.6.9.1 Nomenclatura

Los nombres de este grupo funcional sólo dependen del número de átomos de carbono. Su nomenclatura es similar a la de los ácidos carboxílicos, con la diferencia de que desaparece la palabra ácido y la terminación “oico” y es sustituida por “amida”. Una amida con cinco carbonos se llamaría pentanamida (Figura 9.77).

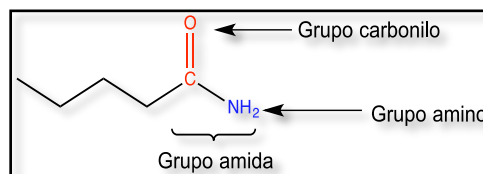


Figura 9.77. Grupo amida.

Para este grupo funcional es posible presentar sustituciones sobre el nitrógeno. Para distinguirla de la cadena con el grupo carbonilo, se antepone una N en itálica mayúscula y se nombra al sustituyente como un radical. Por ejemplo, si existe un metilo sobre el nitrógeno se nombra como *N*-metil; si hay dos metilos como *N,N*-dimetilo. En el caso de que los sustituyentes sean distintos, se ordenaran alfabéticamente (Figura 9.78). Las amidas en comparación con las aminas, no pueden formar sales de amonio. Es común indicar qué tipo de amina se tiene dependiendo de la presencia o de la ausencia de protones en el nitrógeno: con dos hidrógenos se trata de una **amida primaria**, con un hidrógeno, de una **amida secundaria** y sin hidrógenos, de una **amida terciaria** (Figura 9.78).

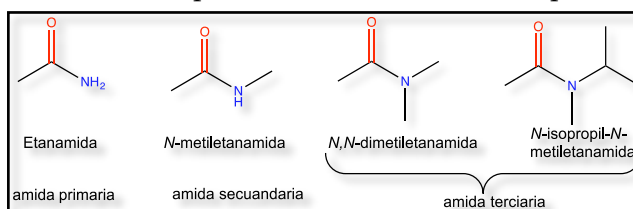


Figura 9.78. Ejemplos de amidas N-sustituidas.

### 9.6.9.2 Usos de las amidas en Ciencias de la Tierra

En el grupo funcional anterior se indicó que la contaminación de los suelos y el agua por parte de compuestos orgánicos son un problema que requiere del estudio de la presencia, persistencia o identificación de metabolitos por degradación. En este caso, se trata de insecticidas en cuya composición existen elementos del grupo amida o a derivados similares (Figura 9.79). Son, por tanto, insecticidas contaminantes.

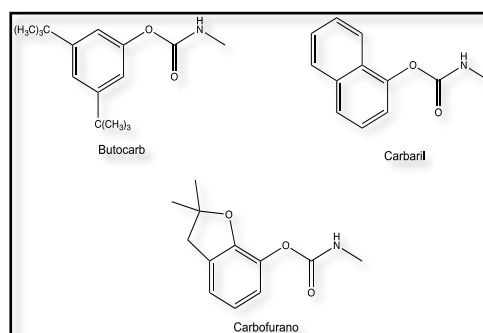
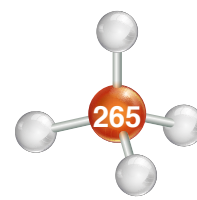


Figura 9.79. Insecticidas contaminantes.

## 9.6.10 Grupos funcionales del azufre, tioles, tioéteres, sulfóxidos y sulfonas

Los grupos funcionales que presentan azufre, en términos generales, son parecidos a otros como el grupo alcohol o el éter; sin embargo, tienen su propia caracterización. Por ejemplo, los **tioles** no forman interacciones tipo puente de hidrógeno; los tioéteres son compuestos susceptibles a oxidarse para formar **sulfóxidos** o las **sulfonas**, mientras que los éteres no se oxidan. Sus aplicaciones son diversas y abarcan un gran número de áreas ya sea dentro de la síntesis, la medicina, o en productos como recubrimientos y fungicidas.





### 9.6.10.1 Nomenclatura

En el caso de los tioles sólo se toma en cuenta el número de carbonos, empleando el nombre del alcano seguido de la terminación “*tiol*”. Son ejemplos el pentanotiol y el heptanotiol (inciso a de la Figura 9.80). En los tioéteres, los compuestos hidrocarbonados unidos a azufre son considerados como sustituyentes y se colocan en orden alfabético. Por ejemplo, el isopropil-metiltioéter (inciso b de la Figura 9.80); para los sulfóxidos o las sulfonas, se usa la misma nomenclatura que considera como sustituyentes a los compuestos hidrocarbonados unidos al azufre. Luego se añade la terminación de “*sulfóxido*” o “*sulfona*”, según sea el grupo funcional. Por ejemplo, el dimetilsulfóxido (inciso c de la Figura 9.80) o la fenil-metilsulfona (inciso d de la Figura 9.80).

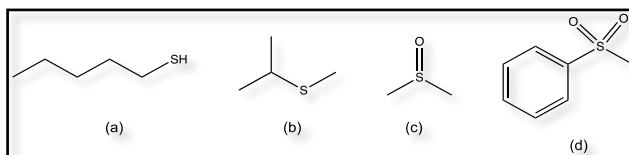


Figura 9.80. Grupos funcionales de azufre.

### 9.6.10.2 Uso de los compuestos de azufre en Ciencias de la Tierra

Los compuestos orgánicos de azufre no son muy útiles en Ciencias de la Tierra. Particularmente en la caracterización de compuestos heteroatómicos del petróleo o la materia orgánica que le dio origen. Una especie que sí es muy importante, pero entra en el apartado de la química inorgánica son los sulfuros ( $S^{2-}$ ) o el ácido sulfúrico ( $H_2SO_4$ ), el primero por ser un anión asociado a los metales y el segundo por ser contaminante de los suelos.

### 9.6.11 Halogenuros de alquilo

Los hidrocarburos que se unen a un *halógeno* ( $F_2$ ,  $Cl_2$ ,  $Br_2$  o  $I_2$ ) reciben el nombre genérico de *halogenuros de alquilo*, en general, el halógeno tiende a ser electronegativo, formando compuestos polares. Poseen puntos de ebullición más bajos, inclusive, que los de los alcanos. Se debe tener en consideración lo siguiente: si en un mismo radical hidrocarbonado se cambia el halógeno por otro de mayor masa molar, aumenta el valor de punto de ebullición.

#### 9.6.11.1 Nomenclatura

La nomenclatura para estos compuestos, de acuerdo con la regulación de la IUPAC, es la siguiente: primero se identifica el halógeno, (en el caso del flúor, se denomina “fluoro”) y a los otros de acuerdo con su nombre: cloro, bromo, yodo, seguido del nombre del alcano. Por ejemplo: bromoetano, cloropropano, yodometano, fluorobutano, etc. (Figura 9.81).

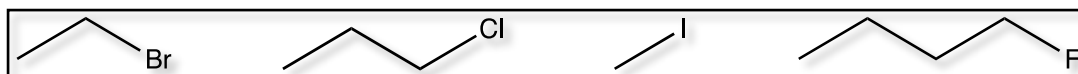


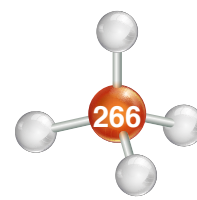
Figura 9.81. Halogenuros de alquilo.

#### 9.6.11.2 Usos de los compuestos de halogenuros de alquilo en Ciencias de la Tierra

Con estos compuestos ocurre lo mismo que con los azufrados: son muy útiles en la vida diaria, pero en Ciencias de la Tierra se emplean más en el contexto de compuestos inorgánicos.

## 9.7 Reacciones de adición y de eliminación

Se llama *reacción química* a los procesos de transformación de la materia o de las sustancias. Las reacciones involucran ruptura y formación de enlaces, lo que no ocurre en una transformación o cambio de fase física. Se abordarán algunas de las reacciones más comunes con una ligera orientación hacia Ciencias de la Tierra, las más relevantes entre cientos que existen.





### 9.7.1 Reacciones de adición

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

En este tipo de reacción, una molécula o compuesto reacciona con otra sustancia orgánica para formar un nuevo compuesto, el cual queda integrado por la suma de ambos. Por ejemplo:

**Adición a alquenos:** Sucede cuando a un doble enlace se adiciona una molécula de halógeno (X= F, Br, Cl, I), dando como resultado un halogenuro de alquilo (Figura 9.82).

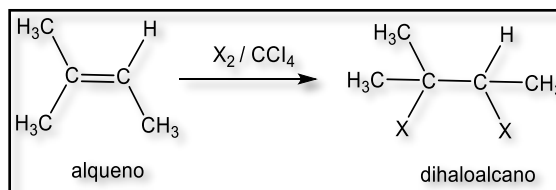


Figura 9.82. Adición a alquenos.

**Hidrogenación de alquinos:** Se produce cuando a un triple enlace se le adicionan átomos de hidrógeno para la obtención de alcanos, con la ayuda de un catalizador (platino, Pt) para acelerar la reacción (Figura 9.83).

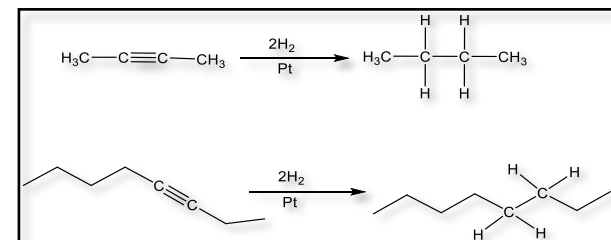


Figura 9.83. Hidrogenación de alquinos.

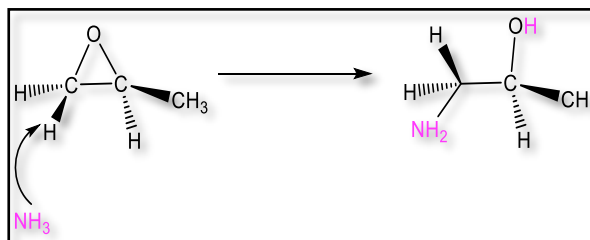


Figura 9.84. Reacción por adición de aminas a epóxidos.

**Adición de aminas a epóxidos:** Se lleva a cabo con el proceso nucleofílico de una molécula de amonio, para la obtención de un amino alcohol (Figura 9.84).

### 9.7.2 Reacciones de eliminación

Se caracterizan por la sustracción de un átomo o de una parte de la molécula que se hace reaccionar. En esta reacción se utiliza un reactivo que se encarga de promover la ruptura de un enlace.

**Reacción de deshidrogenación:** Al realizarse la reacción, se forman alquenos a partir de un halogenuro (Br) de alquilo. La reacción es iniciada por una base muy fuerte como, por ejemplo, el etóxido de potasio en etanol (Figura 9.85).

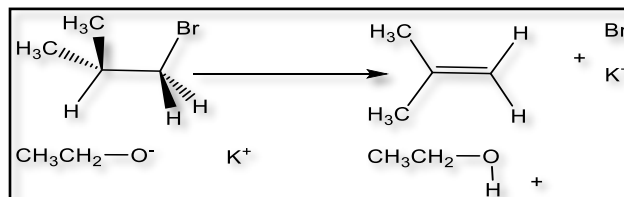


Figura 9.85. Reacción de deshidrohalogenación.

**Deshidratación de alcoholes:** Cuando se coloca un alcohol en medio ácido, aplicando calor, se forman alquenos. Esta reacción, promovida por el ácido sulfúrico como catalizador, acelera la reacción al transformar al alcohol en agua, convirtiéndolo en un grupo saliente para generar un doble enlace (Figura. 9.86)

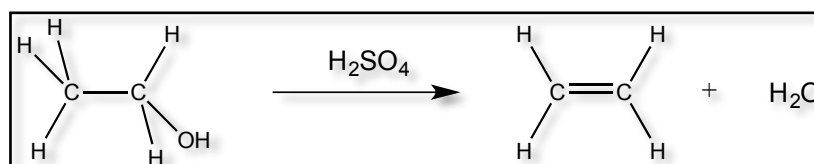


Figura 9.86. Deshidratación de alcoholes.





## 9.8. Aplicaciones de la química orgánica

### 9.8.1 Fraccionamiento de hidrocarburos saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos (S.A.R.A.)

Existen diferentes métodos para caracterizar al petróleo. Uno de los más usados es el análisis S.A.R.A, el cual clasifica a los crudos mediante una técnica de fraccionamiento que divide al hidrocarburo en cuatro fases principales de acuerdo con su solubilidad y polaridad (saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos) (Figura 9.87).

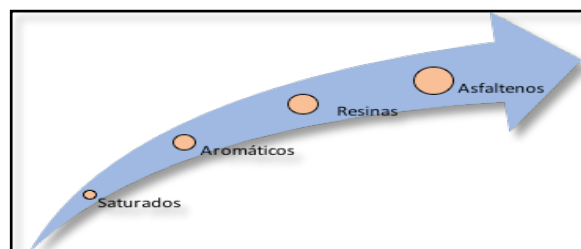


Figura 9.87. Fracciones del Análisis S.A.R.A. de acuerdo con su grado de polaridad.

#### 9.8.1.1 Saturados

Los **compuestos saturados** se encuentran formados únicamente por carbono e hidrógeno; son aceites blancos no polares constituidos por hidrocarburos alifáticos lineales o con cadenas laterales alifáticas y aromáticas.

Los hidrocarburos saturados son la fracción menos polar y consisten, principalmente, en parafinas y cicloparafinas. Su masa molar oscila entre 300 y 600 g/mol, con densidades entre 800 y 900 kg/m<sup>3</sup> y parámetros de solubilidad entre 15 y 16 MPa<sup>0.5</sup>.

En los petróleos crudos, la parte cíclica consiste, comúnmente, en anillos de cinco o seis átomos de carbono. Cada átomo de hidrógeno puede ser sustituido por grupos alquilo (Figura 9.88).

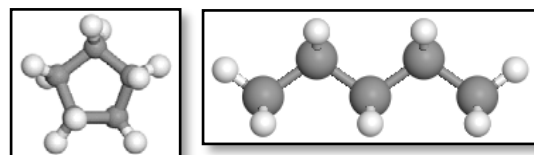


Figura 9.88. Ejemplo de estructuras de parafina y cicloparafina.

#### 9.8.1.2 Aromáticos

Los **aromáticos** consisten en cadenas no polares de carbono en las que predominan sistemas de anillos insaturados. Tienen gran capacidad para disolver otros hidrocarburos de alta masa molar. Algunos pueden tener anillos nafténicos unidos al anillo aromático (Figura 9.89), son líquidos viscosos con una coloración marrón o anaranjada y su masa molar se encuentra entre 300 y 800 g/mol, con densidades de entre 950 y 1050 kg/cm<sup>3</sup> y parámetros de solubilidad entre 19 y 20 MPa<sup>0.5</sup>.

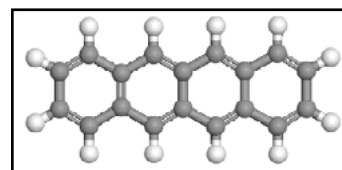


Figura 9.89. Ejemplo de estructura de hidrocarburo aromático.

Debido a las propiedades que los enlaces les confieren, los hidrocarburos aromáticos (Figura 9.89) como el benceno, tolueno y xileno (BTX), son materia prima fundamental en la petroquímica. Contribuyen, además, a aumentar el octanaje en las gasolinas; empero, los aromáticos homólogos superiores representan grandes problemas para la salud y el medio ambiente.

#### 9.8.1.3 Resinas

Las **resinas** son compuestos con gran cantidad de anillos aromáticos y cadenas laterales nafténicas y parafínicas. Por tanto, poseen una elevada cantidad de hidrógeno y carbono con pequeñas cantidades de oxígeno, azufre y nitrógeno (Figura 9.90). Son sólidos negros, quebradizos y brillantes, y constituyen el componente polar no volátil del petróleo; son solubles en *n*-alcanos e insolubles en propano líquido. La masa molar de las resinas oscila entre 700 y 1,300

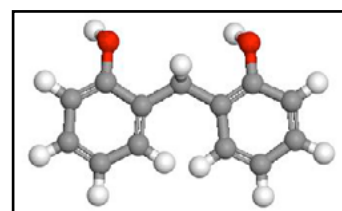


Figura 9.90. Estructura típica de una resina.





g/mol, con densidades aproximadas de  $1,050 \text{ kg/m}^3$  y parámetros de solubilidad de  $20 \pm 0.5 \text{ MPa}^{0.5}$ .

#### 9.8.1.4 Asfaltenos

Los *asfaltenos* son hidrocarburos aromáticos altamente polares de elevada masa molar, que abarcan un amplio rango de composiciones (Figura 9.91). Por ejemplo, el alquitrán.

Son sólidos amorfos de color marrón oscuro o negro, insolubles en *n*-alcanos como el *n*-pentano o *n*-heptano, y solubles en tolueno.

Propician gran cantidad de problemas en un campo petrolero. A pesar de que son los componentes más significativos de los petróleos pesados, la precipitación de asfaltenos es más común en petróleos más livianos, generando obstrucción en los pozos, líneas de flujo, instalaciones superficiales y formaciones del subsuelo.

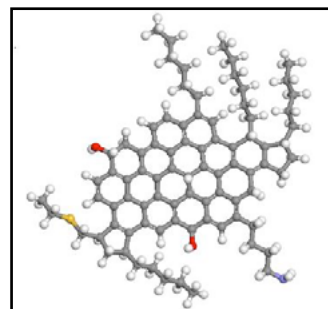


Figura 9.91. Estructura esquemática de un asfalteno.

### 9.8.2 Métodos para realizar el análisis SARA

El análisis de los compuestos saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos (SARA) es aplicable en una amplia variedad de aceites y bitúmenes, lutitas y residuos de petróleo. Es un procedimiento de fraccionamiento sencillo realizable en el laboratorio.

El método consiste en la separación de los componentes de los crudos mediante precipitación con hidrocarburos saturados de baja masa molar. La fracción insoluble recibe el nombre de *asfaltenos* y la soluble de *maltenos*.

Las técnicas de fraccionamiento SARA se han estandarizado y sirven como guía para separar los componentes de un crudo. Sus normas son: ASTM D2006, ASTM D2007-93 y ASTM D4121.

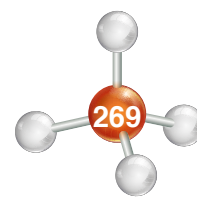
Para determinar la composición de los saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos existen diferentes métodos, algunos de los cuales respetan el procedimiento establecido en los estándares citados. Los procedimientos son los siguientes:

- Cromatografía de capa fina con detección de ionización (TLC-FID, por sus siglas en inglés).
- Cromatografía líquida de alta presión (HPLC, por sus siglas en inglés).
- Cromatografía por exclusión de tamaño (SEC, por sus siglas en inglés).

#### 9.8.2.1 Cromatografía de capa fina con detección de ionización (TLC-FID)

Este tipo de cromatografía se basa en el principio de adsorción y en la interacción entre una fase estacionaria y la muestra. Se utilizan varillas de cuarzo cubiertas con una capa delgada de sílice.

La exposición de la muestra en un disolvente (hexano y tolueno, diclorometano y metanol), produce iones y electrones al entrar en contacto con una llama de hidrógeno, se aplica una diferencia de potencial entre el extremo del quemador y un electrodo colector, produciendo una intensidad de corriente proporcional a la cantidad de cada sustancia. La primera señal detectada en el cromatograma corresponde a los saturados, la segunda a los aromáticos y la tercera a los polares.





### 9.8.2.2 Cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC, por sus siglas en inglés)

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

Este proceso se lleva a cabo utilizando presiones muy elevadas. El método inicia removiendo los asfaltenos por precipitación con *n*-hexano para, posteriormente, diluir el aceite restante en dicho solvente e inyectar el sistema a través de una válvula de inyección. A continuación, se detecta la fracción de saturados por medio del detector RI (índices de refracción) ya que los saturados eluyen primero y no son retenidos por el material de la columna HPLC. A esta fracción le siguen los aromáticos, los cuales son reconocidos en los detectores ultravioleta (UV) e índice de refracción (RI).

Las resinas deben ser eluidas con una fase móvil más polar, mediante un flujo inverso y utilizando diclorometano (DCM, por sus siglas en inglés) como fase móvil.

### 9.8.2.3 Cromatografía por exclusión de tamaño (SEC)

La cromatografía de exclusión es un método de adsorción ampliamente descrito en la norma ASTM D2007-93. Consiste en la precipitación de asfaltenos por la acción de *n*-alcanos (pentano o heptano), por lo que se realiza una separación de maltenos (SAR) mediante una columna mixta de sílice seguida de alúmina (Figura 9.92).

La elución de los hidrocarburos se realiza con *n*-heptano y tolueno, la de los aromáticos con una mezcla de *n*-heptano y tolueno 2:1, mientras que las resinas con una mezcla de DCM, tolueno y metanol 1:1:1.

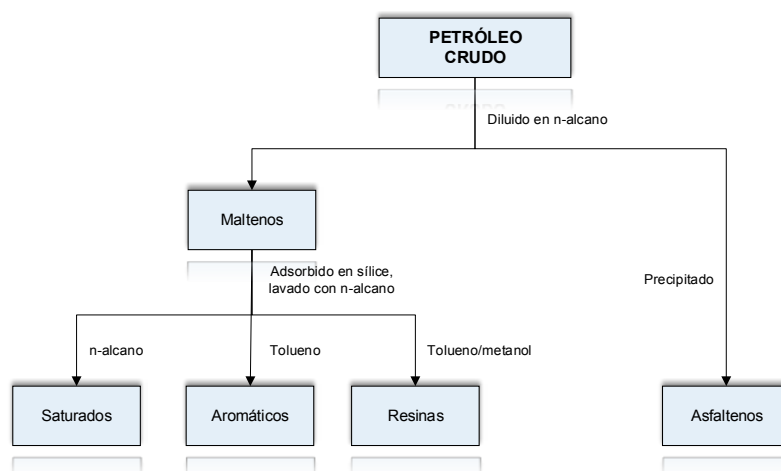


Figura 9.92. Procedimiento de fraccionamiento SARA de acuerdo con la norma ASTM D2007-93.

### 9.8.3 Análisis del petróleo por cromatografía de gases

La cromatografía de gases es una de las técnicas analíticas más usadas y eficientes de separación de mezclas complejas. En la industria petrolera, el proceso de cromatografía de gases es crucial para analizar los muy diversos componentes de distintos hidrocarburos y así poder caracterizar una mezcla diversa. Esta técnica se basa en el principio de velocidad diferencial a la que viaja dicha mezcla gaseosa por un medio con determinada capacidad de retención para compuestos individuales. La capacidad de tener una velocidad de migración diferencial de cada uno de los componentes de la mezcla es el resultado de la selectividad del sistema cromatográfico.

Para el caso específico de los compuestos de un petróleo crudo, incluyendo a los biomarcadores, la cromatografía de gases monodimensional (GC) y la cromatografía de gases bidimensional (GC×GC), con ayuda de la espectrometría de masas (MS), constituyen una poderosa y sensible herramienta de detección, logrando, bajo condiciones analíticas adecuadas, muy excelente resolución.



Aunque es rutinario el uso de sistemas GC simples, la cromatografía de gases acoplada (GC x GC) es más utilizada en función de su mejor resolución al utilizar dos columnas cromatográficas ortogonales con fases estacionarias distintas. Por ejemplo, una columna apolar y otra polar, o viceversa.

El flujo de la primera columna fracciona la mezcla en múltiples segmentos que se transfieren consecutivamente a la segunda columna selectiva (cromatografía rápida), que está conectada a un detector con alta velocidad de respuesta. Dependiendo de los objetivos requeridos, tanto el sistema simple como el doble se pueden acoplar a un espectrómetro de masas con analizador de tiempo de vuelo (MS-TOF).

### 9.8.3.1 Clasificación de métodos cromatográficos

En la caracterización de hidrocarburos se pueden realizar análisis cromatográficos a través de distintos métodos. En la Tabla 9.11 se muestran los sistemas cromatográficos más comunes para separar, detectar e identificar los componentes de una mezcla de acuerdo con su fraccionamiento químico; es decir, enfocada solamente a ciertos grupos de interés, separados de una matriz específica.

Fracciones Saturada y Aromática				Fracción Aromática	Fracción Polar
Cromatografía de Gases				Cromatografía líquida (de alta eficiencia)	
GC-FID GC-TDC Quimioluminiscencia	GC-MS(Q) GC-MS-SIM	GC-MS/MS triple cuadrupolo (QqQ) MRM	GCxGC-MS-TOF GC-HRMS	HPLC (UV, DAD, ELSD) LC-MS	

Tabla 9.11. Clasificación de métodos cromatográficos utilizados para el análisis de petróleo y sus biomarcadores.

El análisis cromatográfico de las fracciones saturada o aromática, aisladas del petróleo o de la roca, sedimento o esquisto, se lleva a cabo por cromatografía de gases con detector de ionización en llama (FID) o con detector de masas (MSD). El último es el método más utilizado.

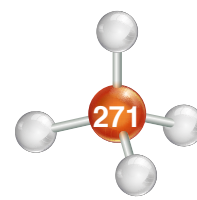
Aunque con menos frecuencia, se ha utilizado un detector de quimioluminiscencia o de conductividad térmica (TCD), que sirve para identificar compuestos heteroatómicos (moléculas orgánicas con nitrógeno, oxígeno o azufre).

Otra forma de analizar la fracción aromática consiste en la utilización de cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) y empleando detectores menos convencionales, pero más específicos, como el detector de fluorescencia (FLD).

Normalmente, las columnas cromatográficas capilares utilizadas para analizar y caracterizar el petróleo y sus biomarcadores son de fase apolar (polidimetilsiloxanos, fenilpolimetilsiloxanos), pero al aumentar los campos de aplicación y la diversidad de biomarcadores de interés, aumenta el número de situaciones en las que se requiere el uso de columnas de fase polar.

El análisis por GC-FID permite comparar de forma sencilla los perfiles cromatográficos, tanto cualitativa como cuantitativamente, siempre y cuando se cuente con sustancias que sirvan como patrón de referencia para identificar los compuestos de interés.

La fracción polar también puede ser analizada por cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) con sistemas de detección UV, DAD, FLD, ELSD o bien, por espectrometría de masas (LC-MS) ya sea con ionización de moléculas por electronebulización a (ESI); ionización química (APCI), o fotoionización (APPI). Los últimos tres métodos, en condiciones de presión atmosférica.





### 9.8.3.2 Análisis cualitativo

Cada componente de una muestra gaseosa proporciona, además del correspondiente tiempo de retención para compuestos individuales, tres datos adicionales: posición, alto y ancho de los picos que conforman un cromatograma. La posición, cuantitativamente expresada como dato de retención, otorga la información cualitativa y los otros dos (altura y anchura), nos brindan información cuantitativa.

En condiciones favorables, es decir, cuando existe buena resolución y los picos se pueden apreciar claramente de forma separada, es posible identificar a los componentes tan sólo por la posición de los mismos respecto a estándares internos de laboratorio, aunque, por lo general, habrá que recurrir a la información obtenida por otros métodos analíticos, preferiblemente por técnicas multiparamétricas como la espectrometría de masas o de infrarrojo (IR).

No existe un método general aplicable a todos los problemas prácticos. La información cromatográfica cualitativa dependerá del conocimiento previo de la composición de las muestras.

En la Figura 9.93 se resumen los procedimientos utilizados para identificar los picos para sistemas cromatográficos convencionales.

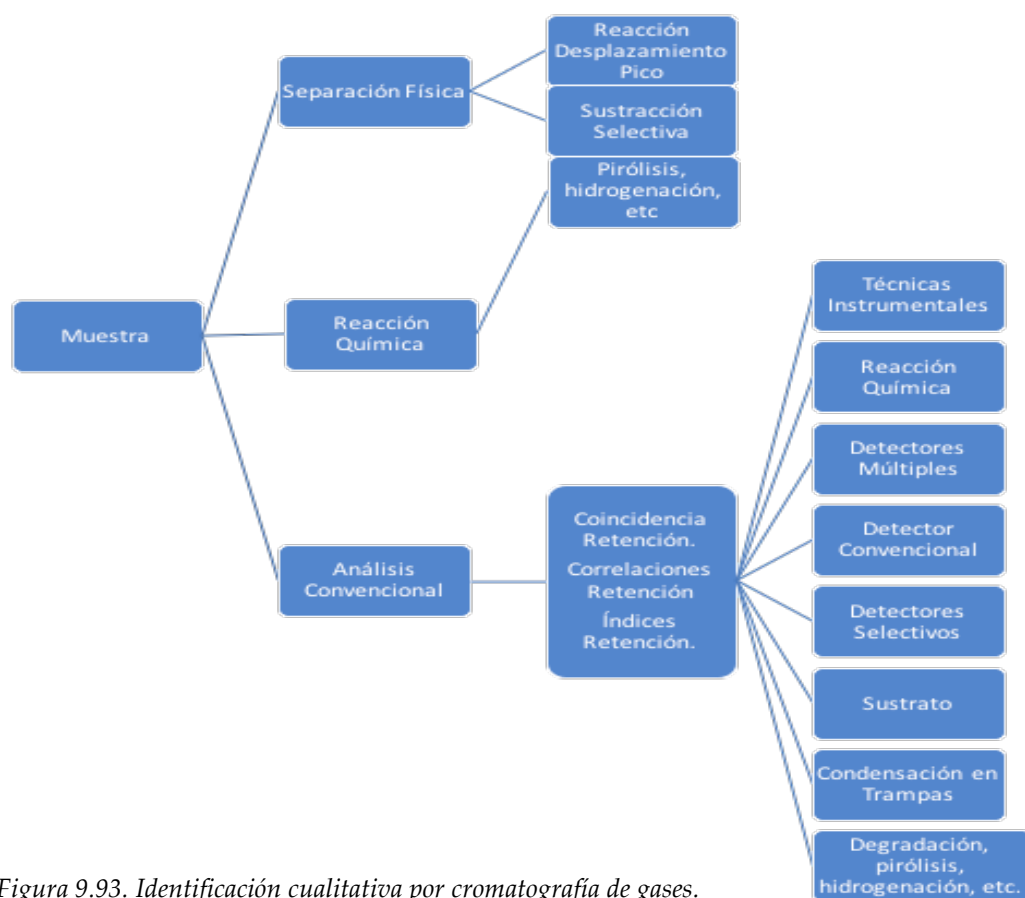
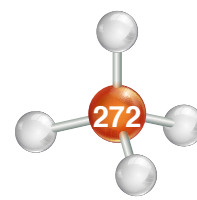


Figura 9.93. Identificación cualitativa por cromatografía de gases.

### 9.8.3.3 Análisis cuantitativo

Normalmente, no es posible identificar todos y cada uno de los componentes que conforman los fluidos de un yacimiento mediante los métodos químicos de separación existentes. Tampoco otros datos de interés, como las propiedades críticas de componentes pesados similares al C<sub>20</sub> o mayores, pueden ser determinados con exactitud por medio de estas técnicas.





Este problema puede ser resuelto con ayuda de métodos experimentales y matemáticos, mediante una caracterización aproximada de los compuestos más pesados.

La caracterización de las fracciones de heptano plus  $C_{7+}$  requiere de varios pasos, el primero consiste en dividir al  $C_{7+}$  en cierto número de fracciones con composición molar conocida. Posteriormente, se define la masa molar, la gravedad específica y el punto de ebullición de cada fracción; por último, se estiman las propiedades críticas y el factor acéntrico para cada fracción de  $C_{7+}$ .

#### 9.8.3.4 Ejemplos de cromatografía para crudos mexicanos

En la Figura 9.94 se presenta una selección de cromatogramas de iones totales al momento (TIC, por sus siglas en inglés), de algunos crudos mexicanos seleccionados.

La característica principal de los aceites mexicanos es la gran cantidad de hidrocarburos coexistentes en un rango molecular bajo ( $<n-C_{12}$ ).

Los biomarcadores pristano y fitano se presentan en bajas a medianas concentraciones, siendo casi la mitad o menor cantidad que los alcanos  $n-C_{17}$  y  $n-C_{18}$  ( $n-C_{17} \gg C_{19}$ -Pr y  $n-C_{18} \gg C_{20}$ -Ph), con excepción de la muestra 72 en la que el pristano es mayor que  $n-C_{17}$ ,  $n-C_{18}$  y fitano. Entre las muestras 70 y 71 se pueden distinguir dos marcos de distribución composicional.

Los resultados para la GC-MS del ejemplo muestran a la serie homóloga de  $n$ -alcanos como la principal fracción resuelta, aunque en el rango  $n-C_8$  a  $n-C_{11}$  aparecen numerosos compuestos de menor punto de ebullición.

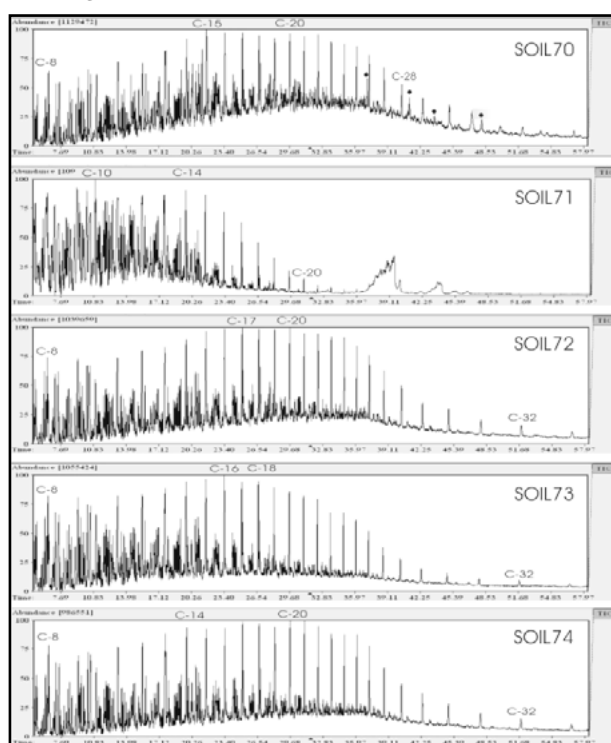


Figura 9.94. Cromatografía crudos mexicanos selectos.

#### 9.8.3.5 Análisis experimental

La fuente más confiable para caracterizar al  $C_{7+}$  es el cúmulo de datos experimentales obtenidos de la destilación por cromatografía de gases a alta temperatura. La técnica del Punto de Ebullición Real (TBP por sus siglas en inglés) provee los datos necesarios para completar esta caracterización, incluyendo cantidades molares y de masa, así como datos clave para cada fracción (gravedad específica, el peso molecular y punto de ebullición), los cuales no pueden ser obtenidos por GC.

La cromatografía de gases (GC), constituye una alternativa más rápida y menos costosa que la destilación TBP. Sin embargo, el análisis por GC sirve únicamente para cuantificar la masa de la cantidad de fracciones de carbono del  $C_{7+}$ . Por ello es recomendable realizar, al menos, un análisis TBP completo para los siguientes casos:

- Yacimientos que pudieran ser candidatos a inyección de gas.
- La mayoría de los yacimientos de gas y condensado.

La aplicación más importante de la cromatografía en la caracterización del  $C_{7+}$  es la destilación simulada por técnicas de GC. La Figura 9.95 muestra el cromatograma de una muestra del Mar





del Norte, cuyos picos dominantes representan parafinas normales, las cuales pueden identificarse hasta C<sub>22</sub>. El hexano grado cromatográfico fue utilizado como patrón interno para la muestra.

En la Figura 9.96 se observan las curvas de destilación obtenidas mediante TBP contra la simulada por GC para la misma muestra. Fue utilizado un factor de corrección al patrón interno del 15% para hacer coincidir ambas curvas.

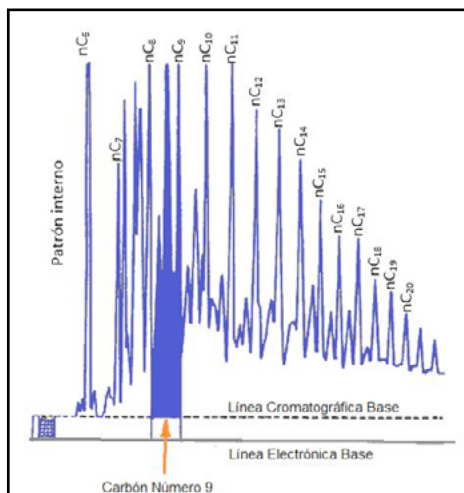


Figura 9.95. Destilación Simulada por GC de una muestra de gas y condensado del Mar Norte.

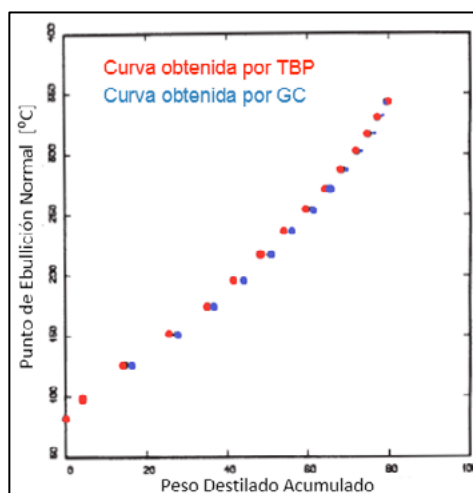


Figura 9.96. Comparación entre curvas de Destilación por TBP y Simulación por GC.

### 9.8.3.6 Distribución molar

La mayoría de los métodos para dividir al C<sub>7+</sub> en un número arbitrario de fracciones, asume que la fracción molar disminuye de forma exponencial en función de la masa molar o el número de átomos de carbono. Asimismo, un modelo más general basado en la distribución gamma ha sido aplicado exitosamente en varios sistemas de aceite y gas y condensados.

La distribución molar se entiende como la relación entre la fracción mol y la masa molar. Esta relación existe únicamente si las fracciones son separadas consistentemente. Estrictamente, la distribución molar es la relación entre la cantidad molar (fracción mol) acumulada y una expresión para la masa molar acumulada.

La siguiente expresión representa la fracción mol acumulada:

$$Q_{zi} = \frac{\sum_{j=1}^i Z_j}{\sum_{j=1}^N Z_j} \dots\dots\dots \text{Ec. 9.1}$$

Y para la masa molar promedio acumulada:

$$Q_{Mi} = \frac{\sum_{j=1}^i Z_j M_j}{\sum_{j=1}^i Z_j} \dots\dots\dots \text{Ec. 9.2}$$

Una gráfica de la Ec. 9.1 vs. la Ec. 9.2 genera una sola curva para una muestra C<sub>7+</sub> destilada a volúmenes de corte constantes.

Algunos métodos utilizan la separación consistente de las fracciones para que la distribución molar pueda ser expresada directamente como una relación entre la fracción mol y la masa molar de cada corte de forma individual.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22



La correlación de viscosidad de Lohrenz-Bay-Clark (LBC) es uno de los intentos más recientes de utilizar la distribución de tipo exponencial para separar las fracciones de  $C_{7+}$ , dividiéndolo en parafinas normales desde  $C_7$  hasta  $C_{40}$  mediante la siguiente relación:

$$z_i = z_{C_6} \exp^{[A_1(i-6)+A_2(i-6)^2]} \dots\dots\dots \text{Ec. 9.3}$$

Donde:

$i$  = número de carbonos

$z_{C_6}$  = fracción mol  $C_6$  medida

$A_1$  y  $A_2$  se determinan por prueba y error para cumplir con:

$$z_{C_{7+}} = \sum_{i=7}^{40} Z_i \dots\dots\dots \text{Ec. 9.4}$$

$$z_{C_{7+}} M_{C_{7+}} = \sum_{i=7}^{40} Z_i M_i \dots\dots\dots \text{Ec. 9.5}$$

Siendo la masa molar de las parafinas determinada por:

$$M_i = (14i + 2)$$

El sistema de ecuaciones para la Ec. 9.4 y Ec. 9.5 puede ser resuelto por Newton-Raphson. Cabe señalar que esta correlación (LBC) no puede ser utilizada cuando  $z_{C_{7+}} < z_{C_6}$  y  $M_{C_{7+}} > M_{C_{40}}$ .

Otra manera más común de aplicar el método exponencial para dividir la fracción  $C_{7+}$  es en su forma lineal, escribiendo la distribución exponencial de forma general, para cualquier  $C_{n+}$  (siendo  $n=7$  un caso especial); como se expresa a continuación:

$$z_i = z_{C_n} \exp^{A[(i-n)]} \dots\dots\dots \text{Ec. 9.6}$$

Donde:

$z_i$  = número de carbonos

$z_{C_n}$  = fracción mol de  $C_n$

$A$  = constante que indica la pendiente de la recta dada por  $\ln z_i$  vs.  $i$

Las constantes  $z_{C_n}$  y  $A$  pueden determinarse explícitamente con la expresión:

$$M_i = 14i + h \dots\dots\dots \text{Ec. 9.7}$$

## 9.9 Autoevaluación

### Cuestionario de autoevaluación Capítulo 9

#### Cuestionario de autoevaluación tema 9.2

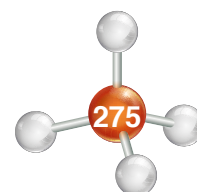
Instrucciones: Lee atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraya la respuesta correcta.

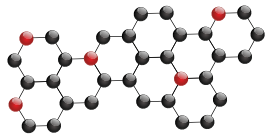
- El enlace  $\sigma$  (sigma) también es denominado:
 

a) Enlace $\pi$ (pi)	b) Enlace doble
c) Enlace sencillo	d) Enlace triple
- Si los alcanos presentan una hibridación  $sp^3$ , el ángulo entre sus enlaces y su denominación es:
 

a) $105.5^\circ$ y tipo $\sigma$ (sigma)	b) $109.5^\circ$ y tipo $\beta$ (beta)
c) $109.5^\circ$ y tipo $\sigma$ (sigma)	d) $109.5^\circ$ y tipo $\gamma$ (gamma)
- Los orbitales atómicos que intervienen en el enlace pi son:
 

a) Un orbital p	b) Dos orbitales p	c) Un orbital s	d) Ninguno es correcto
-----------------	--------------------	-----------------	------------------------





- La combinación lineal de un orbital s y un orbital p pueden generar un:  
a) Enlace  $\pi$  (pi)    b) Enlace  $\sigma$  (sigma)    c) Enlace  $\gamma$  (gamma)    d) Enlace triple
- Este arreglo explica cómo los compuestos de triple enlace son lineales, con un ángulo de  $180^\circ$  y presentan dos enlaces sencillos tipo  $\sigma$  y los dos dobles enlaces tipo  $\pi$ :  
a) Hibridación  $sp^2$     b) Hibridación  $sp^3$     c) Hibridación  $sp$     d) Todos son correctos

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

### Cuestionario de autoevaluación tema 9.3

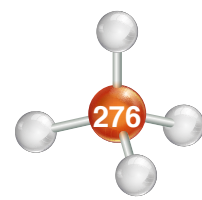
Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

- Un hidrocarburo líquido es el:  
a) Heptano    b) Etano    c) Metano    d) Butano
- Corresponde con un aceite, desde el punto de vista molecular:  
a) Metano    b) Etano    c) Propano    d) Octano
- Hidrocarburo que no corresponde a un gas:  
a) Metano    b) Etano    c) Propano    d) Hexano
- Son hidrocarburos saturados, de enlace simple, de estructura cerrada, con fórmula general  $C_nH_{2n}$ .  
a) Alcanos    b) Isoalcanos    c) Naftenos    d) Alquenos
- Son hidrocarburos saturados (líquidos, sólidos o gases), de cadena abierta o ramificados, con enlaces simples, con fórmula general  $C_nH_{2n+2}$ :  
a) Alcanos    b) Isoalcanos    c) Alquenos    d) Alquinos

### Cuestionario de autoevaluación del tema 9.4

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

- Si los alquenos presentan una hibridación  $sp^2$ , ¿cuál es el ángulo entre sus enlaces y cómo se denominan los tipos de enlaces que los conforman?  
a)  $120^\circ$ ; tipos  $\sigma$  y  $\pi$ .    b)  $119^\circ$  y tipo  $\beta$   
c)  $120^\circ$ ; tipos  $\sigma$  y  $\beta$ .    d)  $125^\circ$ ; tipo  $\sigma$  y  $\sigma$
- ¿Qué sufijo se utiliza cuando se quiere indicar la presencia de dos enlaces dobles?  
a) Sec    b) Eno    c) Dieno    d) Iso
- ¿Cuál de los siguientes es un hidrocarburo líquido?  
a) 1-Propeno    b) 1-Hexeno    c) Eteno    d) 1-Buteno
- Corresponde con un aceite, desde el punto de vista molecular:  
a) Eteno    b) Buteno    c) Propeno    d) Hepteno





5. ¿Cuál de los siguientes no es un gas en condiciones de temperatura ambiente?
- a) Buteno                      b) Eteno                      c) Propeno                      d) Octeno
6. ¿Cuáles son compuestos insaturados donde se alternan enlaces sencillos y dobles en una cadena lineal?
- a) Dienos                      b) Isoalquenos                      c) Cicloalquenos                      d) Olefinas
7. ¿Cuáles son aquellos hidrocarburos insaturados, con fórmula química  $C_nH_{2n}$ ?
- a) Alquinos                      b) Aromáticos                      c) Cicloalquenos                      d) Alquenos
8. ¿Cuáles son hidrocarburos insaturados de cadena cerrada, los cuales contienen al menos un enlace doble en su molécula con formula general  $C_nH_{2n-2}$ ?
- a) Alquinos                      b) Ciclopropano                      c) Cicloalquenos                      d) Olefinas
9. Es un hidrocarburo que tiene un doble enlace:
- a) Etino                      b) Propeno                      c) Butano                      d) Benceno
10. Los alquenos son llamados comúnmente \_\_\_\_\_, en virtud de sus propiedades.
- a) Óleum                      b) Cíclicos                      c) Dienos                      d) Olefinas

### Cuestionario de autoevaluación tema 9.5

Instrucciones: Lea atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraye la respuesta correcta.

1. Si los alquinos presentan una hibridación  $sp$ , ¿cuál es el ángulo entre sus enlaces y cómo se denomina su tipo de enlace y cuántos tipos contiene del mismo?
- a)  $185^\circ$ , dos tipo sigma ( $\sigma$ )                      c)  $180^\circ$ , dos tipo pi ( $\pi$ ) y dos sigma ( $\sigma$ )  
b)  $120^\circ$ , uno tipo  $\sigma$  (sigma)                      d)  $180^\circ$ , uno tipo sigma ( $\sigma$ ) y dos enlaces ( $\pi$ )
2. ¿Cuáles son los hidrocarburos insaturados alifáticos que presentan una hibridación  $sp$  y tienen por lo menos un enlace lineal triple en su molécula?
- a) Alquinos                      b) Aromáticos                      c) Cicloalquinos                      d) Naftalenos
3. ¿Cuáles son los hidrocarburos insaturados, relativamente inestables que tienen la fórmula química  $C_nH_{2n-2}$ ?
- a) Alquinos                      b) Aromáticos                      c) Alcanos                      d) Alquenos
4. ¿Qué sufijo es utilizado cuando se quiere indicar la presencia de un triple enlace?
- a) Ano                      b) Eno                      c) Dieno                      d) Ino
5. ¿Cuál es un hidrocarburo líquido?
- a) Propino                      b) Etino                      c) 1-butino                      d) 1-pentino
6. ¿Qué compuesto corresponde con un gas?
- a) 1-heptino                      b) 1-hexino                      c) Propino                      d) 1-pentino

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

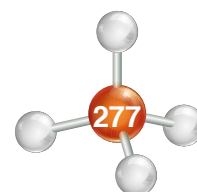
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





7. ¿Cuáles son los compuestos orgánicos cuya característica más importante es la sustitución de uno de los hidrógenos de un hidrocarburo por un hidroxilo (-OH), radical que puede provenir de diversas fuentes, como la disociación del agua?
- a) Alcoholes      b) Ácidos carboxílicos      c) Éteres      d) Aminas
8. ¿Cuáles son los compuestos orgánicos en los que la presencia del oxígeno genera polaridad?
- a) Alcoholes      b) Ácidos carboxílicos      c) Éteres      d) Aminas
9. ¿Cuáles son los compuestos orgánicos generados por la combinación de dos grupos funcionales: el grupo carbonílico y el grupo alcohol?
- a) Alcoholes      b) Ácidos carboxílicos      c) Éteres      d) Aminas
10. ¿Cuáles son los hidrocarburos unidos a nitrógeno, los cuales por tener tres valencias y un par de electrones libres pueden formar diferentes compuestos y, en su caso, reaccionar con otra sustancia y/o presentarse como una sal?
- a) Alcoholes      b) Ácidos carboxílicos      c) Éteres      d) Aminas

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

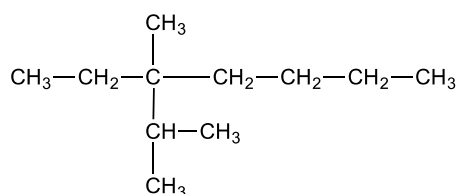
Cap. 21

Cap. 22

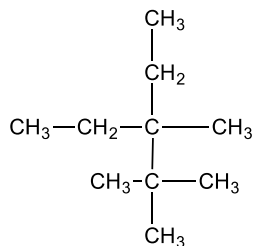
### Ejercicios de Química Orgánica

Instrucciones: A continuación, se presentan algunos hidrocarburos representados en forma desarrollada y semidesarrollada, nombra cada uno de ellos de acuerdo con las normas establecidas por la IUPAC.

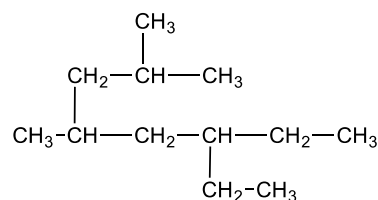
1. Nombrar los siguientes compuestos.



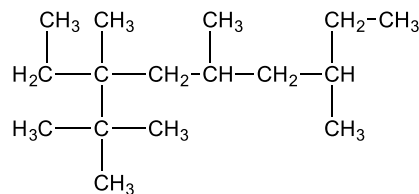
a) \_\_\_\_\_



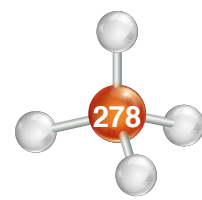
c) \_\_\_\_\_



b) \_\_\_\_\_



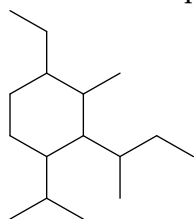
d) \_\_\_\_\_



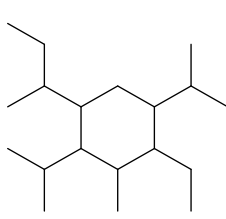




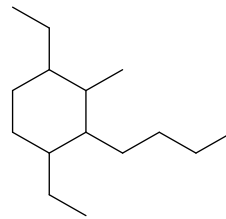
2. Escriba el nombre de los cicloalcanos ramificados de la siguiente figura, los que son generados en la industria petroquímica.



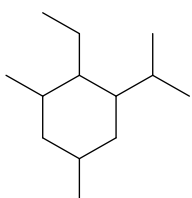
a) \_\_\_\_\_



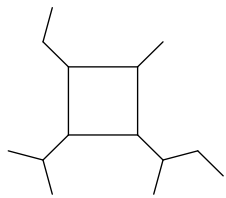
b) \_\_\_\_\_



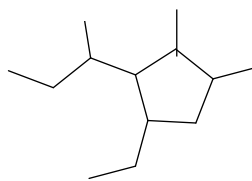
c) \_\_\_\_\_



d) \_\_\_\_\_

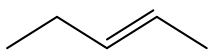


e) \_\_\_\_\_

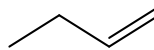


f) \_\_\_\_\_

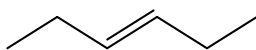
3. Escriba el nombre de las fórmulas desarrolladas simples de los siguientes hidrocarburos insaturados de doble enlace.



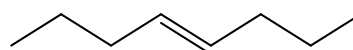
a) \_\_\_\_\_



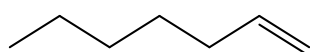
b) \_\_\_\_\_



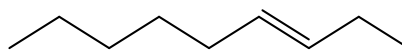
c) \_\_\_\_\_



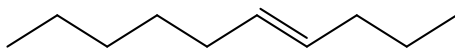
d) \_\_\_\_\_



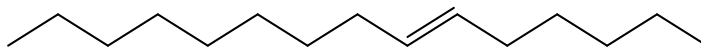
e) \_\_\_\_\_



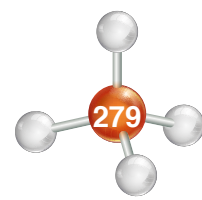
f) \_\_\_\_\_

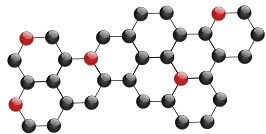


g) \_\_\_\_\_

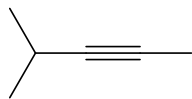


h) \_\_\_\_\_

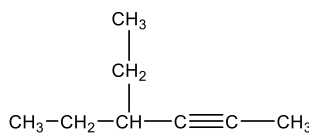




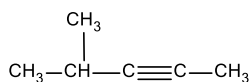
4. Escriba el nombre las siguientes fórmulas desarrolladas conforme la IUPAC.



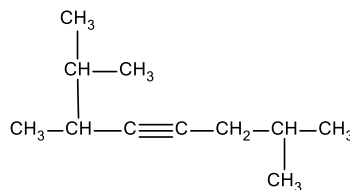
a) \_\_\_\_\_



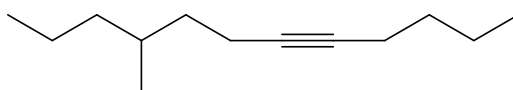
b) \_\_\_\_\_



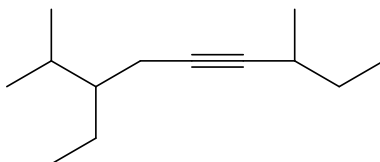
c) \_\_\_\_\_



d) \_\_\_\_\_



e) \_\_\_\_\_

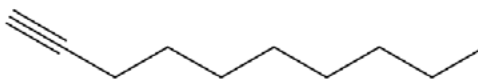


f) \_\_\_\_\_

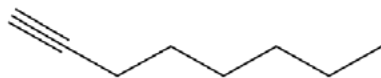
5. Identifique el nombre de su molécula a partir de la fórmula desarrollada de los siguientes alquinos, los que son utilizados en la industria petrolera como base para la fabricación de plásticos, cauchos y flamas para el corte de metales.



a) \_\_\_\_\_



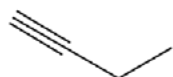
b) \_\_\_\_\_



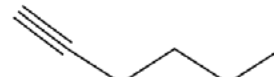
c) \_\_\_\_\_



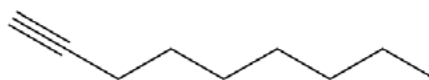
d) \_\_\_\_\_



e) \_\_\_\_\_



f) \_\_\_\_\_



g) \_\_\_\_\_



# Capítulo 10

## Comportamiento de sustancias y diagramas de fases

Héctor Erick Gallardo Ferrera, Isaías Castro Armendáris, Ibrahim Gallardo Ferrera

### 10.1 Introducción

Resulta muy familiar que las sustancias puedan existir en cualquiera de los tres estados de agregación de la materia: sólido, líquido y gaseoso. El agua, por ejemplo, cuando se encuentra en estado sólido y a presión atmosférica, al ser calentada se derrite para formar un líquido. Si este proceso continúa, eventualmente formará vapor. Estos cambios son discontinuos, por lo que sólo ocurren a una temperatura definida.

Además del evento descrito, que puede ocurrir en condiciones superficiales, la mayoría de las sustancias pueden presentar comportamientos más complejos a diferentes rangos de presión. En este capítulo se abordan conceptos fundamentales necesarios para que el lector comprenda: qué son y cómo pueden ser representadas las condiciones de equilibrio termodinámico, por qué las fases cambian en forma discontinua y cómo utilizar una ecuación de estado cúbica para resolver problemas de equilibrio líquido/vapor.

### 10.2 Conceptos fundamentales

Para estudiar el comportamiento de las fases que puedan presentarse en un momento dado, los estudios deben acotarse a regiones específicas denominadas *sistemas*, los cuales nombran una porción del universo que se desea estudiar, y que se encuentra constituido por uno o más componentes que se relacionan entre sí. Al resto del universo, que no es considerado dentro del marco de estudio, se le denomina *alrededores*. Por la forma en que estos dos elementos interactúan, los sistemas se clasifican en:

- Sistema abierto:** cuando hay transferencia de energía y materia con los alrededores.
- Sistema cerrado:** si sólo se transfiere energía, en forma de calor, a los alrededores.
- Aislado:** en caso de no haber intercambio de energía o materia con los alrededores.

Como los componentes de un sistema pueden tener diferentes características a lo largo del tiempo, para describirlos se hace uso de un conjunto de variables fisicoquímicas denominadas *variables de estado*. Estas propiedades pueden clasificarse como *intensivas*, si su valor no depende de la

#### Sumario

##### 10.1 Introducción

##### 10.2 Conceptos fundamentales

##### 10.3 Fases, componentes y estados de equilibrio de un sistema

##### 10.4 Implicaciones para los diagramas de fase

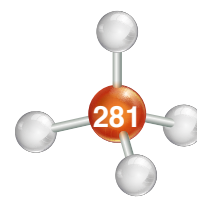
##### 10.5 Problemas de equilibrio-líquido vapor

##### 10.6 Uso de ecuaciones de estado cúbicas en problemas de fases

##### 10.7 Solución a problemas flash de un componente puro

##### 10.8 Solución a problemas flash en sistemas multicomponente

##### 10.9 Autoevaluación





cantidad de materia (como la temperatura, presión y densidad); o *extensivas*, si hay una dependencia (como el volumen, cantidad de sustancia y peso).

En general, la razón de dos propiedades extensivas resulta en una intensiva y al producto de dividir cualquier propiedad extensiva por la cantidad de materia asociada se denomina *propiedad específica* (por ejemplo, el volumen específico).

Las propiedades básicas con las que se puede describir a un sistema son:

1. La *masa* ( $m$ ) se refiere a la cantidad de materia, típicamente medida en gramos, que posee un objeto e indica su resistencia a ser acelerado por una fuerza.
2. La *cantidad de sustancia* ( $n$ ) muestra las partículas fundamentales (normalmente átomos o moléculas) que constituyen una unidad de materia, usualmente medida en moles.
3. El *volumen* ( $V$ ) puede ser medido en metros cúbicos o litros, establece el espacio y forma que ocupa la materia y, en el caso de los fluidos, depende del contenedor donde se encuentre.
4. La *temperatura* ( $T$ ) refleja la cantidad de energía presente en un cuerpo, en función de su nivel de agitación intermolecular. Cuando la actividad molecular es alta, se asocia una sensación térmica de calor; mientras que, si es baja, a una de frialdad. Su magnitud suele medirse en Kelvin.
5. La *presión* ( $p$ ) refleja el número de moléculas presentes en un cuerpo. Se define como la relación que guarda una fuerza con el área en la que se distribuye. Generalmente se mide en Pascales.
6. *Energía* ( $E$ ) es la capacidad que tiene la materia de producir un trabajo. Puede ser medida en Joules.

De la combinación de estas propiedades pueden obtenerse otras complementarias, como la *densidad* ( $\rho$ ), que muestra la materia por unidad de volumen en un objeto o el *peso* ( $\omega$ ), que es la aceleración con la que un planeta atrae una masa hacia su centro, entre otras. Al conjunto de variables (normalmente presión y temperatura), utilizadas para referir a un estado del sistema, se les denomina, *condiciones*.

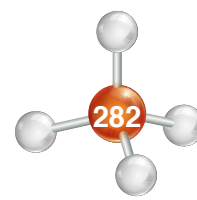
Es de gran relevancia hacer notar que las propiedades de la materia dependen tanto de las partículas que le constituyen, como de las interacciones que ocurren entre ellas; por lo que definir el estado de agregación de la materia es sumamente importante para entender el comportamiento de los elementos de un sistema.

### 10.3 Fases, componentes y estados de equilibrio de un sistema

La *fase* es definida como una parte de un sistema físicamente distinta de las otras. Posee fronteras fácilmente distinguibles: sus propiedades intensivas se encuentran definidas en las condiciones establecidas, para cualesquiera de los estados de agregación en los que se encuentre la materia (sólido, líquido o gaseoso); por lo tanto, una fase puede considerarse como un *subsistema*.

Dependiendo del problema en cuestión, puede hacerse referencia a uno o más *componentes*. Éstos son las entidades químicas (o compuestos moleculares) independientes que definen al sistema, como el ácido sulfhídrico ( $H_2S$ ), el dióxido de carbono ( $CO_2$ ), el metano ( $CH_4$ ), la ortoclase ( $KAlSi_3O_8$ ) y el óxido de silicio ( $SiO_2$ ), entre otros. Estos componentes pueden ser agrupados en fases *estables*, *inestables* o *metaestables*.

Por su parte, se define al *estado de equilibrio* que guardan las fases como el elemento en el que desaparecen las tendencias de cambio. De acuerdo con esta noción, dos o más fases se encuentran presentes en un sistema e interactúan entre sí, por lo que pueden intercambiar energía, volumen





y partículas, sin que se aprecien cambios en sus propiedades. Esto maximiza la cantidad de energía no-útil para que el sistema realice un trabajo. Este fenómeno es denominado *entropía*, se representa como  $S$  y tiene unidades de energía entre temperatura, en este caso, un cambio de fases.

### 10.3.1 Estados de equilibrio en sistemas de un solo componente

Cuando coexisten dos fases en equilibrio dentro de un sistema de un solo componente, los subsistemas deben cumplir la siguiente condición:

$$\max[S_1(E_1, V_1, n_1) + S_2(E_2, V_2, n_2)], \quad \text{Ec.10.1}$$

o bien, en términos de los cambios en la entropía:

$$dS_1(E_1, V_1, n_1) + dS_2(E_2, V_2, n_2) = 0, \quad \text{Ec.10.2}$$

lo que implica que, al ser  $E$ ,  $V$  y  $n$  cantidades que varían en forma independiente en las fases 1 y 2, el equilibrio entre ellas se alcanza cuando:

$$T_1 = T_2, \quad p_1 = p_2, \quad \mu_1 = \mu_2, \quad \text{Ec.10.3}$$

donde  $\mu$  es el potencial químico de la fase en cuestión, e indica la *energía libre* (aquella que está disponible para realizar un trabajo) para que las partículas que le constituyen se muevan hacia otro subsistema; al alcanzar condiciones de equilibrio, los potenciales de las fases tendrán el mínimo valor posible para que estas coexistan sin que haya cambios.

En un momento dado, y en condiciones establecidas, la Ec. Ec.10.3 permite definir al potencial químico como una función de las condiciones de *equilibrio mecánico* (en la presión) y *térmico* (en la temperatura), como:

$$\mu_1(T, p) = \mu_2(T, p). \quad \text{Ec.10.4}$$

Como la Ec. 10.4 presenta dos incógnitas:  $p$  y  $T$ , si especificamos una de ellas podríamos resolver la igualdad establecida con los potenciales químicos (que en adelante será la condición de *equilibrio químico*) para la otra. En el caso del agua como componente puro, en condiciones de presión atmosférica el estado sólido (hielo) se encuentra en equilibrio con el líquido a una sola temperatura (Figura 10.1). En este punto se satisface a la Ec. Ec.10.4, y no ocurrirán cambios en las fases estudiadas. Si la temperatura fuera mayor, como el líquido tiene el menor potencial químico, el hielo tendería a derretirse para mantener estable al sistema y si la temperatura fuera menor, como es ahora el hielo el que posee el menor potencial, el líquido se congelaría.

La discusión sobre el comportamiento del agua sólida y líquida nos permite señalar que los estados de equilibrio de un sistema no sólo deben satisfacer las condiciones mecánicas, térmicas y químicas de la Ec. Ec.10.4, sino que además deben ser estables.

La estabilidad de los estados de equilibrio se ejemplifica en la Figura 10.2, que la relaciona con el movimiento de una esfera descendente: mientras la partícula se mantenga en una pendiente, se encontrará en un estado inestable y rodará hasta llegar a un punto en el que su movimiento sea impedido. Si llega a caer en una depresión que no sea el fondo, la esfera estará en un estado metaestable y aún podría descender si se le provee de energía adicional; mientras que, si llega al fondo, habrá encontrado un estado estable

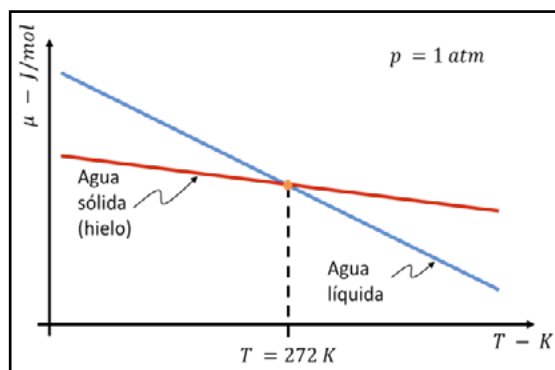


Figura 10.1 Representación esquemática de la dependencia de la temperatura en los potenciales químicos de una sustancia (agua) en estado líquido y sólido.





donde no puede haber otro descenso. De manera similar, en los estados de equilibrio, la estabilidad se asocia al menor valor posible de la energía libre en el sistema.

El potencial químico guarda una relación directa con la *energía libre de Gibbs* (que es la energía útil para que el sistema realice un trabajo y que se representa como  $G = n\mu$ ), por lo que las condiciones de equilibrio entre las fases uno y dos de un sistema pueden ser escritas también como:

$$G_1(T, p) = G_2(T, p) \dots\dots\dots \text{Ec.10.5}$$

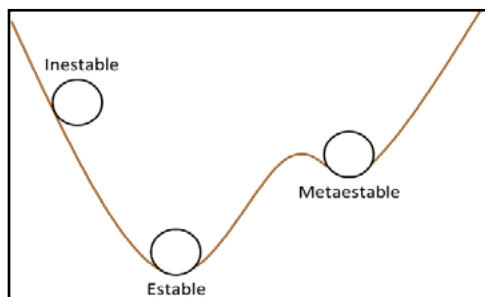


Figura 10.2 Representación de la estabilidad de un estado de equilibrio.

Cuando existen tres fases distintas en un sistema de un solo componente, las observaciones hechas sobre las Ecs. Ec.10.4 y Ec.10.5 pueden extenderse considerando que deben ser satisfechas dos condiciones simultáneas:  $\mu_1 = \mu_2$  y  $\mu_2 = \mu_3$ , o que  $G_1 = G_2$  y  $G_2 = G_3$  (resultando redundante que  $\mu_1 = \mu_3$  o  $G_1 = G_3$ ).

### 10.3.2 Estados de equilibrio en sistemas multicomponente

Los sistemas pueden constituirse por uno o más componentes. Esta composición puede indicarse para cada elemento por los moles presentes, con la fracción molar ( $X$ ), o la materia, con la fracción másica ( $W$ ); que para un componente  $i$  en una fase  $P$  de una mezcla se definen como:

$$X_i^P = \frac{\text{moles del componente } i \text{ en la fase } P}{\text{moles totales de la fase } P} = \frac{n_i^P}{n^P} = \frac{n_i^P}{\sum_{j=1}^C n_j^P}, \dots\dots\dots \text{Ec.10.6}$$

$$W_i^P = \frac{\text{masa del componente } i \text{ en la fase } P}{\text{masa total de la fase } P} = \frac{m_i^P}{m^P} = \frac{m_i^P}{\sum_{j=1}^C m_j^P}, \dots\dots\dots \text{Ec.10.7}$$

mismas que pueden relacionarse a través de la masa molar del componente ( $M$ ) como:

$$X_i^P = \frac{W_i^P / M_i}{\sum_{j=1}^C W_j^P / M_j}, \dots\dots\dots \text{Ec.10.8}$$

$$W_i^P = \frac{X_i^P M_i}{\sum_{j=1}^C X_j^P M_j}, \dots\dots\dots \text{Ec.10.9}$$

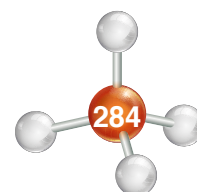
donde  $P$  puede ser  $L, V$  o  $S$  si la fase es líquida, vapor o sólida, en forma correspondiente; y en situaciones donde se tenga más de una fase en el mismo estado de agregación, puede añadirse un número a las letras que le representan (por ejemplo:  $L_1, L_2, \dots, L_N$ ). Un caso de las Ecs. Ec.10.6 y Ec.10.7 corresponde a las fracciones totales, que son:

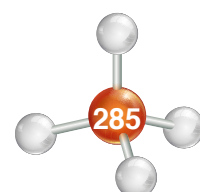
$$X_i^T = \frac{\text{moles totales del componente } i \text{ en todas las fases}}{\text{moles totales de todo el sistema}} = \frac{\sum_{P=1}^N n_i^P}{\sum_{P=1}^N \sum_{j=1}^C n_j^P}, \dots\dots \text{Ec.10.10}$$

$$W_i^T = \frac{\text{masa total del componente } i \text{ en todas las fases}}{\text{masa total de todo el sistema}} = \frac{\sum_{P=1}^N m_i^P}{\sum_{P=1}^N \sum_{j=1}^C m_j^P}, \dots\dots \text{Ec.10.11}$$

Las Ecs. Ec.10.6, Ec.10.7, Ec.10.10 y Ec.10.11 deben cumplir que:

$$\sum_{i=1}^C X_i^P = 1, \quad \sum_{i=1}^C W_i^P = 1, \quad \sum_{i=1}^C X_i^T = 1, \quad \sum_{i=1}^C W_i^T = 1. \dots\dots\dots \text{Ec.10.12}$$





Considerando lo anterior, puede generalizarse el marco conceptual de la Ec. Ec.10.4 para describir cualquier tipo de equilibrio de fases en sistemas multicomponentes al incluir las composiciones como:

$$\mu_i^P(T, p, \{X\}^P) = \mu_i^{P+1}(T, p, \{X\}^{P+1}) \quad \text{para todo } i = 1, 2, \dots, C \text{ y } P = 1, 2, \dots, N - 1 \quad \text{Ec.10.13}$$

Toda vez que la Ec. Ec.10.13 puede reescribirse en términos de la energía libre Gibbs, y en lugar de la fracción molar puede utilizarse la fracción másica de la mezcla para describir su composición.

Al inspeccionar la Ec. Ec.10.13 se observa que habrá  $C(N - 1)$  ecuaciones y  $2 + N(C - 1)$  variables independientes ( $T$ ,  $p$  y las  $C - 1$  fracciones molares en cada fase). De esta manera, el número de grados de libertad en este problema ( $F$ ) está dado por el número total de variables menos el número de ecuaciones restrictivas definidas por las condiciones de equilibrio químico:

$$F = 2 + N(C - 1) - C(N - 1) = C - N + 2 \quad \text{Ec.10.14}$$

La Ec. Ec.10.14, normalmente denominada *regla de fases de Gibbs*, indica que el número de condiciones que deben especificarse para caracterizar completamente el estado de un sistema de  $C$  componentes es definido por los  $F$  grados de libertad. Esta información se obtiene típicamente de la presión, temperatura y composición.

### 10.3.3 La entropía en el comportamiento de fases de los sistemas

La entropía se relaciona con el orden en la estructura molecular y cómo ocurren las interacciones entre las moléculas de un sistema. Por ejemplo, cuando las partículas se encuentran en condiciones en las que las fuerzas de repulsión y el desorden gobiernan su estado de agregación, el sistema tenderá a existir como un gas y poseerá una mayor entropía que si aumentan los efectos de la atracción y el orden que, contrariamente, propician que la materia se mantenga como un sólido. Las condiciones límite para los casos descritos son las de un gas ideal y un sólido perfecto (Figura 10.3).

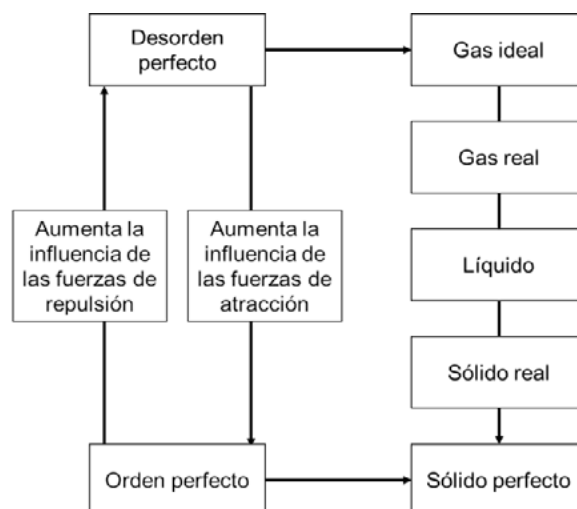
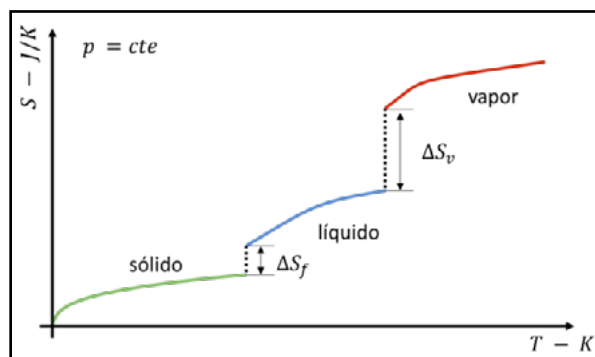


Figura 10.3. Estados de agregación de la materia de acuerdo con la influencia de las fuerzas de atracción y repulsión que existen entre las partículas que le constituyen.

Al suministrar energía en forma de calor a un sistema aumenta su entropía. De esta manera, el incremento en la temperatura de un cuerpo sólido a presión constante propiciará que la agitación entre sus moléculas sea mayor y la entropía cambiará paulatinamente hasta llegar al punto de fusión, en el que se romperá la estructura sólida del cuerpo y se generará un líquido. Al no tener un volumen definido, las interacciones entre las moléculas del fluido incrementarán y, con ellas, el nivel de desorden del sistema. En este punto, justo donde se rompe con la estructura ordenada del cuerpo sólido, se observa un incremento discontinuo en la entropía. Si el proceso continúa y se incrementa la temperatura del líquido hasta llegar al punto de vaporización, el cambio de fases a un vapor con un nivel de agitación molecular mayor nuevamente provocará un salto discontinuo en la entropía (Figura 10.4).



Figura 10.4. Comportamiento de la entropía durante los cambios de fase en un sistema. El incremento es mayor en la transición líquido-gas, que en la transición sólido-líquido.



## 10.4 Implicaciones para los diagramas de fase

Una forma conveniente para describir las condiciones en las que se presentan los estados de equilibrio de un sistema es mediante el uso de diagramas de fase. Éstos son representaciones gráficas de las fronteras a las que existen las fases, respecto a un conjunto de variables (presión, temperatura, densidad, composición, entre otras). En esta sección se explica el uso de algunos de estos diagramas para diferentes sistemas.

### 10.4.1 Sistemas de un solo componente

La Figura 10.5 muestra el diagrama de fases presión-temperatura de un componente puro, en el cual, logran identificarse las regiones en las que la sustancia puede existir como sólido, líquido o vapor. Estas regiones se encuentran limitadas por tres curvas:

1. **Curva de sublimación.** Indica las condiciones en las que coexisten un sólido con su vapor en condiciones de equilibrio en un sistema.
2. **Curva de vaporización.** Muestra las condiciones en las que coexisten un líquido con su vapor en condiciones de equilibrio en un sistema.
3. **Curva de fusión.** Muestra las condiciones en las que coexisten un sólido con su líquido en condiciones de equilibrio en un sistema.

En las regiones de una sola fase, los grados de libertad son dos, por lo que deben definirse tanto a la presión como a la temperatura. En las regiones de dos fases, al encontrarse sobre una línea, debe especificarse una variable (presión o temperatura) para conocer a la otra. Las tres curvas que delimitan las regiones de una fase convergen en el punto triple, que muestra las condiciones en las que las tres fases del sistema pueden coexistir en equilibrio. El último no posee grados de libertad, ya que su existencia es puntual en el diagrama.

El último punto de la curva de vaporización del diagrama de la Figura 10.5 esquematiza las condiciones del punto crítico que, para un componente puro, representa el límite en el que puede distinguirse una fase líquida de una en estado vapor y, que en general, representa el punto en el que las propiedades intensivas de estas fases son idénticas. Por sobre éste se localiza la región de los fluidos supercríticos, donde, nuevamente, hay dos grados de libertad en el sistema.

Otros diagramas útiles para describir los estados de los sistemas de un solo componente son aquéllos que

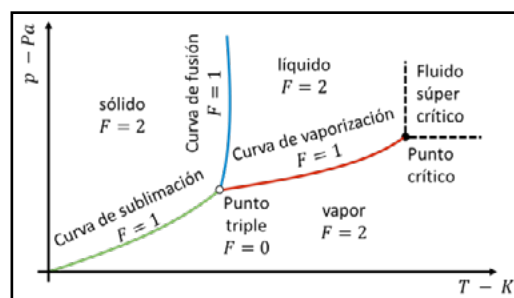
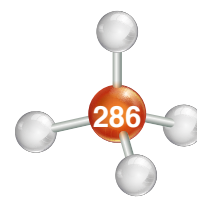


Figura 10.5. Diagrama de fases  $p - T$  de un componente puro.





muestran el comportamiento temperatura-densidad (Figura 10.6) y presión-volumen (Figura 10.7). En ellos se puede observar que las condiciones en las que existen dos fases en el sistema se extienden a una región dentro de una envolvente que, a su vez, está delimitada por las curvas de fusión, vaporización y sublimación del diagrama  $p - T$ .

La Figura 10.8 ejemplifica el uso de estos diagramas mediante un proceso de expansión a temperatura constante (trayectoria  $\overline{ABCD}$ ), en el que se reduce la presión de un sistema que originalmente se encontraba formado por líquido. En  $\overline{AB}$  el volumen del sistema es reducido hasta llegar a la presión de vapor, a la que se forma la primera burbuja de gas en el sistema. Luego, de  $\overline{BC}$  se entra a la envolvente de fases formada en el diagrama  $p - V$ , por lo que la cantidad de gas aumenta conforme se expande el sistema y el líquido disminuye hasta tener sólo una gota infinitesimal a condiciones de la presión de vapor. Finalmente, de  $\overline{CD}$  se tiene como única fase al vapor.

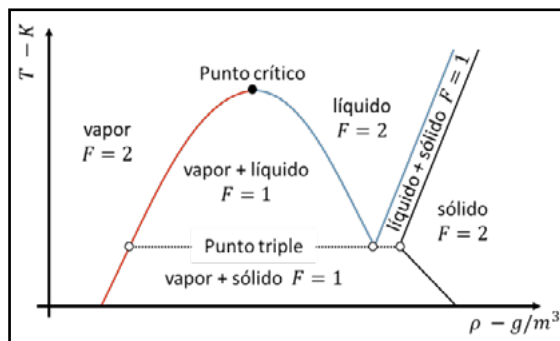


Figura 10.6. Diagrama de fases  $T - \rho$  de un componente puro.

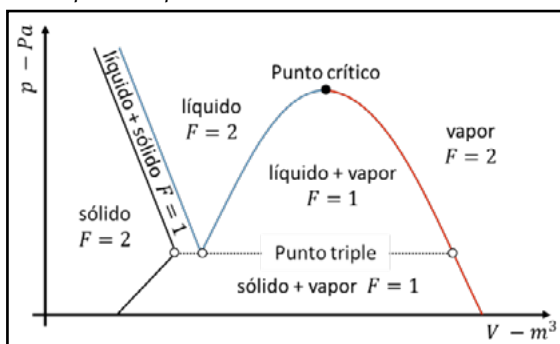


Figura 10.7. Diagrama de fases  $p - V$  de un componente puro.

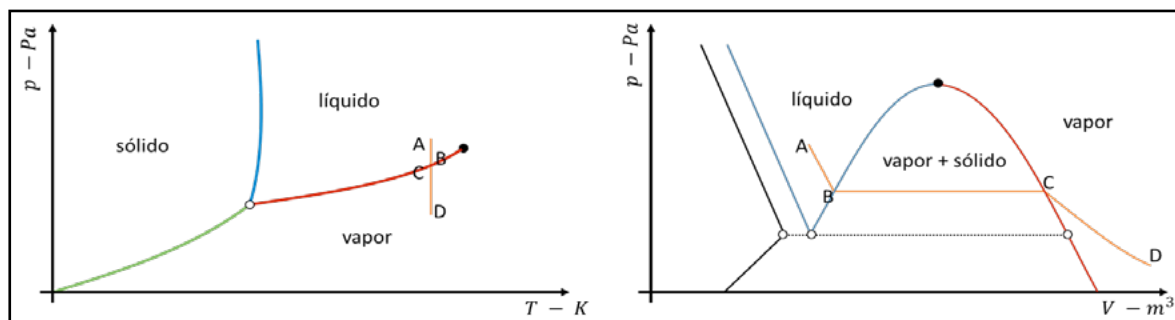


Figura 10.8. Esquematación de un proceso de compresión a temperatura constante en los diagramas  $p - T$  y  $p - V$ .

La Figura 10.9 muestra el comportamiento tridimensional de los diagramas presión-volumen-temperatura para un componente puro. La formación de los sólidos en un sistema depende de las condiciones de presión y temperatura a las que se forman sus cristales, ya que éstas definirán su estructura en un momento dado.

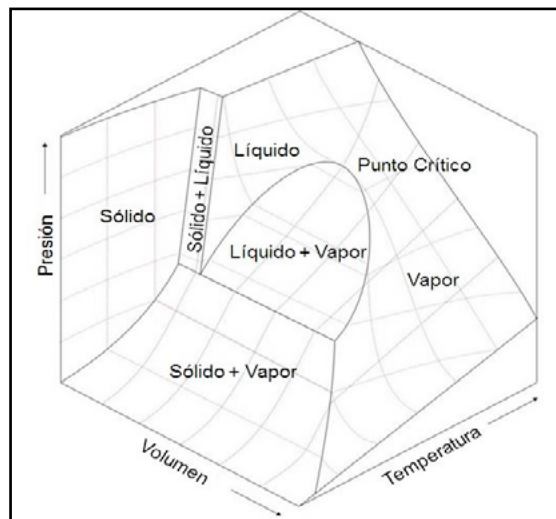


Figura 10.9 Diagrama  $p - V - T$  de un sistema de un solo componente.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

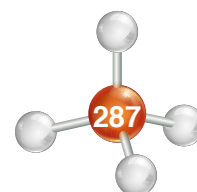
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





### 10.4.2 Diagramas composicionales para sistemas multicomponente

El comportamiento  $p - T$  de los sistemas multicomponente resulta ligeramente más complejo que el de los sistemas puros por la interacción de sus moléculas. La explicación de estos diagramas dependerá de la aplicación. No obstante, en esta sección se estudiará el uso de los diagramas composicionales.

La Figura 10.10 muestra un diagrama típico de presión-composición para una mezcla de dos componentes (A y B) a una temperatura constante. Al tratarse de dos componentes, sólo debe describirse una de las composiciones, ya que la otra será su conjugado, de acuerdo con la Ec. 10.12. Por ejemplo, cuando la fracción del componente A sea la unidad, la del componente B será cero.

En la misma Figura 10.10, los puntos por encima de la envolvente indican las condiciones en las que la mezcla existe en Fase 1; de igual forma, las combinaciones de composición y presión por debajo de la envolvente indican las condiciones a las que la mezcla se encuentra completamente en la Fase 2. Por su parte, las presiones para los casos en los que la mezcla se encuentra constituida por un solo componente corresponden a una presión límite descrita en el diagrama de la Figura 10.5 para A o B (por ejemplo, si se tratase de un sistema líquido-vapor, se referirá a la presión de vapor; si fuese uno líquido-sólido, sería la de fusión, y si fuera uno sólido-vapor, la de sublimación). El área encerrada por las curvas indica la región y condiciones en las que coexisten ambas fases en diferentes proporciones.

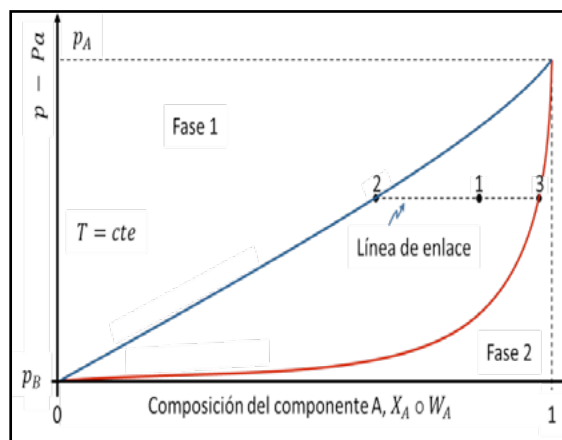


Figura 10.10. Diagrama  $p$  - composición de un sistema de dos componentes o binario.

Las líneas que unen las composiciones en el diagrama de la Figura 10.10 se denominan *líneas de enlace*. En los sistemas binarios estas son siempre horizontales, y pueden ser utilizadas para determinar las cantidades de la Fase 1 y la Fase 2 presentes en un momento dado. Así, la proporción molar  $Yn$  de las fases se encontrará dada como:

$$Yn_1 = \frac{\text{moles totales de la fase 1}}{\text{moles totales de la mezcla}} = \frac{X_i^T - X_i^2}{X_i^1 - X_i^2}, \dots\dots\dots \text{Ec.10.15}$$

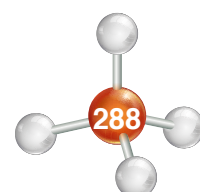
$$Yn_2 = \frac{\text{moles totales de la fase 2}}{\text{moles totales de la mezcla}} = \frac{X_i^T - X_i^1}{X_i^2 - X_i^1}, \dots\dots\dots \text{Ec.10.16}$$

y la proporción másica  $Ym$  de las fases se encontrará dada como:

$$Ym_1 = \frac{\text{masa total de la fase 1}}{\text{masa total de la mezcla}} = \frac{W_i^T - W_i^2}{W_i^1 - W_i^2}, \dots\dots\dots \text{Ec.10.17}$$

$$Ym_2 = \frac{\text{masa total de la fase 2}}{\text{masa total de la mezcla}} = \frac{W_i^T - W_i^1}{W_i^2 - W_i^1}, \dots\dots\dots \text{Ec.10.18}$$

donde  $Yn_1 + Yn_2 = 1$  y  $Ym_1 + Ym_2 = 1$ . Por ejemplo, para una mezcla cuya composición está representada en el punto 1, la composición de la Fase 1 en condiciones de equilibrio se indica en el punto 2, y la de la Fase 2, en el punto 3. La distancia de la línea  $\bar{1}2$  respecto de la  $\bar{2}3$  es la relación







composicional de la Fase 1 en la mezcla y la distancia de la línea  $\bar{13}$  respecto de la  $\bar{23}$  indica la proporción de la Fase 2.

La descripción realizada sobre el diagrama de la Figura puede extenderse en forma análoga al de la Figura 10.11, que presenta un diagrama temperatura-composición para el mismo sistema de dos componentes A y B. En este caso, el valor de la temperatura, cuando el sistema consta de un solo componente, puede hacer referencia a la de fusión, vapor o sublimación de A o B.

En caso de tratar más de dos componentes, pueden analizarse los efectos composicionales sobre un diagrama ternario. Estos tienen forma de triángulos equiláteros, en cuyos ejes se indica la fracción de un componente del cero a uno y se construyen estableciendo los estados de equilibrio que pueden ocurrir con diferentes composiciones a una misma  $p$  y  $T$ . La Figura 10.12 esquematiza el uso de estos gráficos.

La convención usual en los diagramas ternarios consiste en graficar el componente más ligero en la cima del diagrama y el más pesado en la parte izquierda inferior. Cada uno de los lados del triángulo representan una mezcla de dos componentes y los valores en su interior muestran las posibles combinaciones de los tres componentes. La composición, en cualquier punto, puede ser determinada mediante líneas perpendiculares a los lados del diagrama, por lo que en la Figura 10.12, la longitud de cada línea indica la composición de los componentes en el sistema. Las fracciones de los componentes en cualquier punto, al interior del diagrama, pueden ser calculados como:

$$X_1^T = \frac{l_1}{l_T}, \quad X_2^T = \frac{l_2}{l_T}, \quad X_3^T = \frac{l_3}{l_T}, \quad \text{Ec.10.19}$$

donde,

$$l_T = l_1 + l_2 + l_3 \dots\dots\dots \text{Ec.10.20}$$

La Figura 10.13 muestra las características típicas de los diagramas ternarios para un sistema que forma dos fases a una  $T$  y  $p$  constantes. La curva binodal indica las condiciones en las que dos fases distintas coexisten, por lo que cualquier composición que se encuentre en su interior permitirá que ambas coexistan en equilibrio. Como en los diagramas de composición binarios, las líneas de enlace indican las condiciones en las que la mezcla existe a una misma composición total y

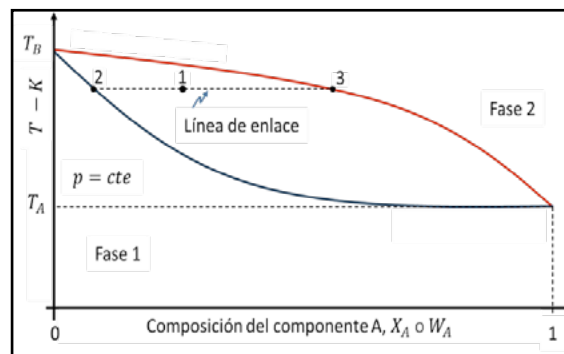


Figura 10.11. Diagrama  $T$  – **composición** de un sistema de dos componentes o binario.

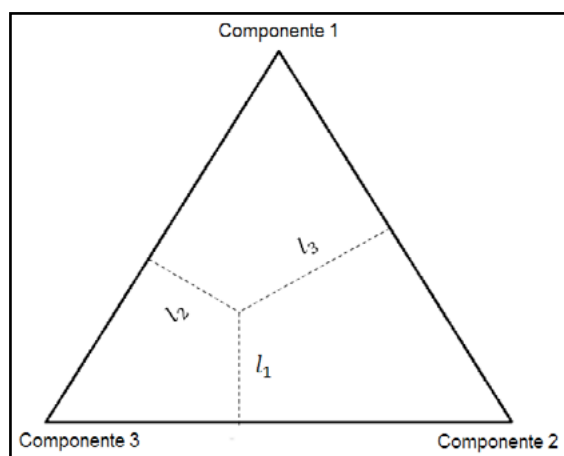


Figura 10.12. Esquematización del uso de un diagrama ternario.

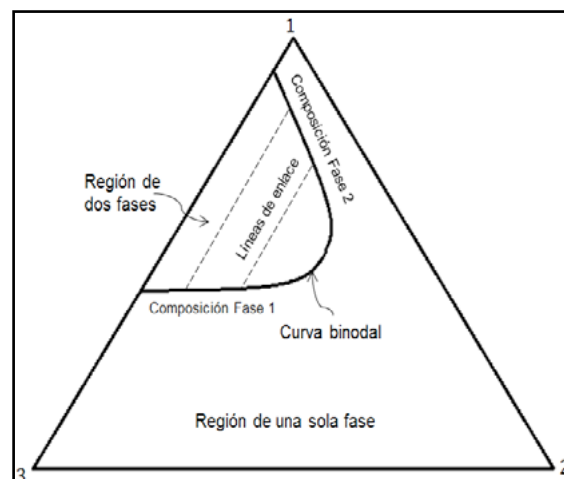


Figura 10.13. Esquematización del uso de un diagrama ternario.



sólo cambian la proporción de una fase en la mezcla conforme se pase del lado de la Fase 1 a la Fase 2.

La aplicación de los diagramas ternarios puede extenderse a sistemas de más de tres componentes mediante el uso de *pseudo-componentes*, estos son agrupaciones de elementos que constituyen al sistema con características similares.

### 10.5 Problemas de equilibrio-líquido vapor

En el caso de los sistemas líquido-vapor, una forma conveniente de expresar los estados de equilibrio considera la fugacidad entre las fases ( $f$ ):

$$f^{P_1} = f^{P_2}, \dots\dots\dots \text{Ec.10.21}$$

donde  $P$  puede hacer referencia a los diferentes subsistemas de fluidos en contacto.

La fugacidad de una fase se define como el valor de presión requerido para que, a una temperatura dada, las propiedades de un sistema satisfagan la ecuación de un gas ideal. Esto permite expresarla en términos de un factor de ajuste denominado *coeficiente de fugacidad* ( $\phi$ ):

$$f^{P_1} = \phi^P p, \dots\dots\dots \text{Ec.10.22}$$

El cual mide la desviación de la energía libre del subsistema real respecto al que tendría si fuera un gas ideal. Esta propiedad se determina como:

$$\ln|\phi^P| = \ln\left|\frac{f^P}{p}\right| = \int_{p_0}^p \frac{(Z^P - 1)}{p} dp, \dots\dots\dots \text{Ec.10.23}$$

donde el factor de desviación  $Z$  se define como el volumen que ocuparían las moléculas de una sustancia real, a la presión y temperatura imperantes, respecto del que ocuparían si éstas fueran un gas ideal a las mismas condiciones:

$$Z^P = \frac{V^P(n^P, p, T)}{V^{GAS IDEAL}(n^P, p, T)}, \dots\dots\dots \text{Ec.10.24}$$

dado que el volumen ideal de un gas puede obtenerse como  $V^{GAS IDEAL} = n^P RT/p$ , la Ec. 10.24 puede reescribirse como:

$$pV^P = Z^P n^P RT, \dots\dots\dots \text{Ec.10.25}$$

donde, como se observó en el Capítulo 5,  $R$  es la constante universal de los gases. Como se muestra en la siguiente sección, la manera más simple de conocer las condiciones de equilibrio de un sistema entraña el uso de una *ecuación de estado (EDE)* que describa el comportamiento del factor de compresibilidad de los gases reales.

En el caso de una mezcla, todos los componentes deben cumplir con la condición de equilibrio químico, por lo que:

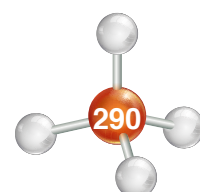
$$f_i^{P_1} = f_i^{P_2}, \dots\dots\dots \text{Ec.10.26}$$

donde:

$$f_i^P = \phi_i^P X_i^P p, \dots\dots\dots \text{Ec.10.27}$$

lo que implica que las  $C$  especies deberán permanecer en equilibrio.

El problema básico para definir a los cálculos de equilibrio se denomina *flash* y consiste en determinar el estado termodinámico en el que una proporción molar de una fase  $P_2$  evoluciona





de una fase  $P_1$ . Para un componente puro, los cálculos se centran en determinar la presión de vapor, para lo que se estiman las condiciones de presión y temperatura a las que existe una proporción molar infinitesimal de una fase en equilibrio con la otra.

En el caso de un sistema multicomponente, se plantea la solución al problema de balance de materia planteado por Rachford-Rice, que se realiza para cada componente y para las fases existentes como:

$$n_{total_i} = n_{P_{1i}} + n_{P_{2i}} + \dots + n_{P_{Ni}}, \quad \dots \quad \text{Ec.10.28}$$

que, en términos de las fracciones fase mol y las composiciones, son:

$$\frac{n_{total_i}}{n_{total}} = \frac{n_{P_{1i}}}{n_{total}} + \frac{n_{P_{2i}}}{n_{total}} + \dots + \frac{n_{P_{Ni}}}{n_{total}} = \frac{n_{P_{1i}}}{n_{P_1}} \frac{n_{P_1}}{n_{total}} + \frac{n_{P_{2i}}}{n_{P_2}} \frac{n_{P_2}}{n_{total}} + \dots + \frac{n_{P_{Ni}}}{n_{P_N}} \frac{n_{P_N}}{n_{total}},$$

o bien,

$$X_i^T = X_i^{P_1} Y n_{P_1} + X_i^{P_2} Y n_{P_2} + \dots + X_i^{P_N} Y n_{P_N}. \quad \dots \quad \text{Ec.10.29}$$

Para el caso particular del equilibrio de una fase líquida y una vapor, donde  $P_1 = V, P_2 = L, Y n_{P_1} = F_V, Y n_{P_2} = F_L$ , la Ec. Ec.10.29 puede reescribirse en términos de las constantes de equilibrio de la mezcla ( $K_i$ ), que se definen como la relación de las fracciones molares de las fases del sistema definidas a condiciones de equilibrio:

$$K_i = \frac{X_i^V}{X_i^L} = \frac{\phi_i^L}{\phi_i^V}. \quad \dots \quad \text{Ec.10.30}$$

De esta manera, las fracciones molares de las fases pueden indicarse como:

$$X_i^L = \frac{X_i^T}{K_i F_V + F_L} = \frac{X_i^T}{K_i F_V + (1 - F_V)}, \quad \dots \quad \text{Ec.10.31}$$

$$X_i^V = \frac{K_i X_i^T}{K_i F_V + F_L} = \frac{X_i^T}{K_i F_V + (1 - F_V)}. \quad \dots \quad \text{Ec.10.32}$$

Considerando condiciones establecidas en la Ec. Ec.10.12, la solución a este balance puede realizarse en términos de  $F_V$  planteando que:

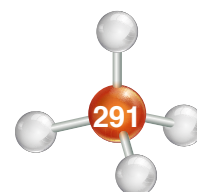
$$h(F_V) = \sum_{i=1}^c (X_i^V - X_i^L) = \sum_{i=1}^c (X_i^L K_i - X_i^L) = \sum_{i=1}^c \frac{X_i^L (K_i - 1)}{1 + F_V (K_i - 1)} = 0, \quad \dots \quad \text{Ec.10.33}$$

donde  $h(F_V)$  es una función objetivo útil para determinar la proporción molar de las fases.

### 10.6 Uso de ecuaciones de estado cúbicas en problemas de fases

Una parte importante del estudio del comportamiento de fases de un sistema recae en la predicción de los diferentes estados de equilibrio que pueden ocurrir a lo largo de un proceso. Para ello, se hace uso de *ecuaciones de estado*.

Una ecuación de estado (EDE) es una expresión constitutiva de la materia que relaciona las variables de presión, volumen y temperatura, por lo que es posible describir el estado de un sistema a través de ellas. No obstante, estas herramientas, por sí mismas, no permiten predecir el





comportamiento de las fases, sino que deben ser usadas con otras condiciones que definan los estados esperados, Ecs. Ec.10.21 y Ec.10.26.

### 10.6.1 Sistemas puros

Existen diversas EDE's disponibles en la literatura, muchas de las cuales pueden ser representadas por una forma extendida del modelo de van der Waals como:

$$p = \frac{RT}{v - b} - \frac{a\alpha(T, T_c, \omega)}{v^2 + \delta v - \epsilon^2}, \quad \text{Ec.10.34}$$

donde  $R$  es la constante universal de los gases,  $T$  la temperatura,  $v$  el volumen molar,  $a$  y  $\alpha$  representan a las fuerzas intermoleculares y se definen como:

$$a = \Omega_a \frac{\alpha(T_r, \omega) R^2 T_c^2}{p_c}, \quad \text{Ec.10.35}$$

$$\alpha = [1 + m]^2, \quad \text{Ec.10.36}$$

mientras que  $b$  simboliza el volumen intermolecular:

$$b = \Omega_b \frac{RT_c}{p_c}, \quad \text{Ec.10.37}$$

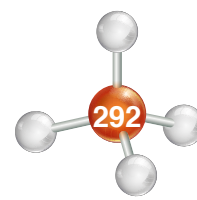
los parámetros  $\delta$  y  $\epsilon$  se incluyen para mejorar los cálculos, y los subíndices  $c$  indican las condiciones críticas del componente. La Tabla 10.1 define las variables  $\delta$ ,  $\epsilon$ ,  $\Omega_a$  y  $\Omega_b$  de algunos modelos, mientras que la Tabla 10.2 indica las funciones utilizadas para obtener el valor de  $m$  en los mismos.

EDE	$\delta$	$\epsilon$	$\Omega_a$	$\Omega_b$	Parámetros
Van der Waals (VDW, 1883)	0	0	27/64	1/8	2: $a, b$
Redlich-Kwong (RK, 1949)	$b$	0	0.42748	0.08664	2: $a, b$
Soave (SRK, 1972)	$b$	0	0.42748	0.08664	3: $a, b, \alpha$
Peng-Robinson (PR, 1976)	$2b$	$b$	0.45724	0.07790	3: $a, b, \alpha$
Patel-Teja (PT, 1982)	$b + c$	$\sqrt{bc}$	$f(\omega)$	$f(\omega)$	4: $a, b, c, \alpha$

Tabla 10.1. Parámetros para modelos de EDEC's comúnmente utilizados.

EDE	$m$
VDW	0
RK	$\sqrt[4]{T_c/T} - 1$
SRK	$(0.48 + 1.574\omega - 0.176\omega^2)(1 - \sqrt{T/T_c})$
PR	$\begin{cases} (0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2)(1 - \sqrt{T/T_c}), & \omega \leq 0.49 \\ (0.3796 + 1.485\omega - 0.1644\omega^2 + 0.01667\omega^3)(1 - \sqrt{T/T_c}), & \omega > 0.49 \end{cases}$
PT	$(0.452413 + 1.30982\omega - 0.295937\omega^2)(1 - \sqrt{T/T_c})$

Tabla 10.2. Funciones para estimar el parámetro  $m$  para las EDEC's de la Tabla 9.1.





El número de parámetros utilizados en una ecuación de estado depende de la sustancia analizada. En general, los modelos de dos parámetros son útiles para estimar el comportamiento de sustancias puras, los de tres para compuestos normales, y los de cuatro para sistemas con componentes polares.

Como se observa en la Tabla 10.1, los términos  $\Omega_a$  y  $\Omega_b$  son constantes para la mayoría de las EDE's y sus valores son determinados evaluando una  $Z_c$ , que es propuesta por cada autor, en las condiciones de VDW (Figura 10.14):

$$\left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_{PC} = 0 \quad y \quad \left(\frac{\partial^2 p}{\partial v^2}\right)_{PC} = 0. \quad \text{Ec.10.38}$$

En la ecuación de Patel-Teja, el volumen intermolecular también depende de un factor  $c$ , que se define como:

$$c = \Omega_c \frac{RT_c}{p_c}, \dots \dots \dots \text{Ec.10.39}$$

y los valores de  $\Omega_a$ ,  $\Omega_b$  y  $\Omega_c$  son correlacionados mediante el parámetro experimental  $\xi$ , mediante las siguientes expresiones:

$$\Omega_a = 3\xi^2 + 3(1 - 2\xi)\Omega_b + \Omega_b^2 + \Omega_c, \quad \text{Ec.10.40}$$

$$\Omega_c = 1 - 3\xi, \dots \dots \dots \text{Ec.10.41}$$

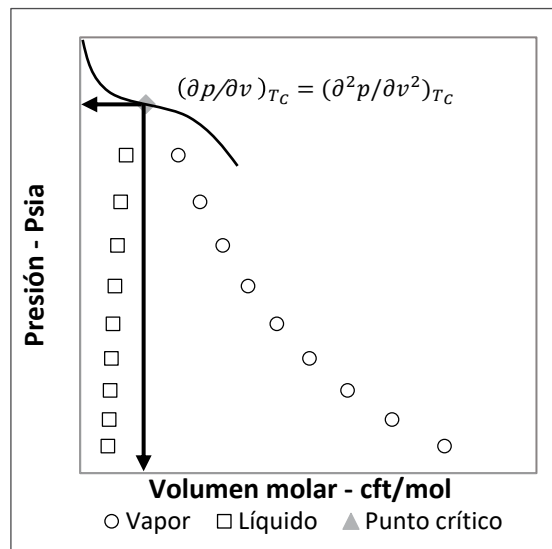


Figura 10.14. Isotherma del punto crítico en un diagrama  $p$ - $v$  de un componente puro.

donde  $\Omega_b$  es la raíz positiva menor de la siguiente ecuación cúbica:

$$\Omega_b^3 + (2 - 3\xi)\Omega_b^2 + 3\xi^2\Omega_b - \xi^3 = 0, \quad \dots \dots \dots \text{Ec.10.42}$$

y  $\xi$  es un término experimental definido como:

$$\xi = 0.329032 - 0.076799\omega + 0.0211947\omega^2. \quad \dots \dots \dots \text{Ec.10.43}$$

Cuando la Ec. Ec.10.34 se reescribe y es resuelta para el factor  $Z$ , se llega a:

$$Z^3 + AZ^2 + BZ + C, \quad \dots \dots \dots \text{Ec.10.44}$$

donde los coeficientes de la Ec. Ec.10.44 son:

$$A = (\delta_D - b_D - 1), \quad \dots \dots \dots \text{Ec.10.45}$$

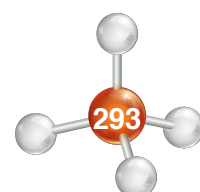
$$B = [a_D - \epsilon_D^2 - \delta_D(b_D + 1)], \quad \dots \dots \dots \text{Ec.10.46}$$

$$C = [\epsilon_D^2(b_D + 1) - a_D b_D], \quad \dots \dots \dots \text{Ec.10.47}$$

donde el subíndice  $D$  indica que los parámetros son adimensionales, y se definen como:

$$a_D = \frac{a\alpha(T_r, \omega)p}{(RT)^2}, \quad \delta_D = \frac{\delta p}{RT}, \quad b_D = \frac{bp}{RT}, \quad \epsilon_D = \frac{\epsilon p}{RT}, \quad Z = \frac{vp}{RT}. \quad \dots \dots \dots \text{Ec.10.48}$$

La Ec. Ec.10.44 implica que se obtendrán tres raíces para cada conjunto de valores, que pueden ser tres reales o una real y dos imaginarias (para su solución puede utilizarse el método de Cardano o de Vieta). De estas, debe seleccionarse la que sea más estable para las fases (la que indique la menor energía de Gibbs); no obstante, un criterio común es utilizar la raíz más pequeña para la fase líquida y la más grande para el vapor.







Además, debe resolverse la Ec. Ec.10.23, lo que para un componente puro resulta:

$$\ln|\phi^P| = a_D I - \ln|Z^P - b_D| - (1 - Z), \quad \text{Ec.10.49}$$

donde  $I$  puede ser:

$$I = \begin{cases} (\delta_D^2 + 4\epsilon_D^2)^{-\frac{1}{2}} \ln \left| \frac{2Z + \delta_D - (\delta_D^2 + 4\epsilon_D^2)^{\frac{1}{2}}}{2Z + \delta_D + (\delta_D^2 + 4\epsilon_D^2)^{\frac{1}{2}}} \right|, & \text{cuando } (\delta^2 - 4\epsilon) \neq 0 \\ -\frac{1}{Z + \frac{\delta_D}{2}}, & \text{cuando } (\delta^2 - 4\epsilon) = 0 \end{cases}, \quad \text{Ec.10.50}$$

### 10.6.2 Sistemas multicomponente

En el caso de las mezclas, deben usarse promedios ponderados de las propiedades de cada especie. Para esto se utilizan reglas de mezclado derivadas de diferentes criterios estadísticos. Las expresiones más utilizadas para obtener las propiedades de las mezclas se derivan de la forma de las ecuaciones de estado de Virial, se denominan *reglas de mezclado aleatorias* o de van der Waals, y se definen como:

$$a_{mix}^P = \sum_i^N \sum_j^N X_i^P X_j^P \sqrt{a_i^P a_j^P} (1 - d_{ij}), \quad \text{Ec.10.51}$$

$$b_{mix}^P = \sum_i^N X_i^P b_i^P, \quad \text{Ec.10.52}$$

$$\delta_{mix}^P = \sum_i^N X_i^P \delta_i^P, \quad \text{Ec.10.53}$$

$$\epsilon_{mix}^P = \sum_i^N X_i^P \epsilon_i^P, \quad \text{Ec.10.54}$$

donde el subíndice *mix* indica que corresponde a un parámetro de la mezcla y  $d$  representa a los parámetros de interacción binaria entre las especies  $i$  y  $j$ . El parámetro  $(1 - d_{ij})$  representa los efectos debidos a la interacción entre moléculas diferentes, siendo  $d_{ii} = 0$  y  $d_{ij} = d_{ji}$ , y sus valores pueden correlacionarse como:

$$d_{ij} = \psi_i \left[ 1 - \left( 2 \frac{v_{c_i}^{1/6} v_{c_j}^{1/6}}{v_{c_i}^{1/3} + v_{c_j}^{1/3}} \right)^\theta \right], \quad \text{Ec.10.55}$$

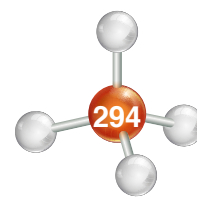
donde  $v_c$  es el volumen molar ( $V/n$ ) medido en el punto crítico de los componentes, y  $\theta$  y  $\psi$  son parámetros ajustables del modelo.

La solución de la Ec. Ec.10.23 extendida al caso de las mezclas resulta en:

$$\ln|\phi_i| = \frac{a_{D mix}}{(\delta_{D mix}^2 + 4\epsilon_{D mix}^2)^{1/2}} \left[ \frac{\Delta\delta_i \delta_{D mix}^2 + 4\Delta\epsilon_i \epsilon_{D mix}^2}{\delta_{D mix}^2 + 4\epsilon_{D mix}^2} - \Delta a_i \right] \times$$

$$\ln \left| \frac{2Z + \delta_{D mix} + (\delta_{D mix}^2 + 4\epsilon_{D mix}^2)^{1/2}}{2Z + \delta_{D mix} - (\delta_{D mix}^2 + 4\epsilon_{D mix}^2)^{1/2}} \right| - \ln|Z - b_{D mix}| + \frac{\Delta b_i b_{D mix}}{Z - b_{D mix}} -$$

$$\frac{a_{D mix}}{\delta_{D mix}^2 + 4\epsilon_{D mix}^2} \left[ \frac{2(2Z + \delta_{D mix})\Delta\epsilon_i \epsilon_{D mix}^2 + (\delta_{D mix} Z - 2\epsilon_{D mix}^2)\Delta\delta_i \delta_{D mix}}{Z^2 + \delta_{D mix} Z - \epsilon_{D mix}^2} \right], \quad \text{Ec.10.56}$$





donde las derivadas adimensionales de los parámetros de la EDEC requieren definir una regla de mezclado, y se obtienen como:

$$\Delta a_i = \frac{1}{na_{mix}} \left[ \frac{\partial n^2 a_{mix}}{\partial n_i} \right]_{n_i \neq j, T}, \quad \Delta b_i = \frac{1}{b_{mix}} \left[ \frac{\partial nb_{mix}}{\partial n_i} \right]_{n_i \neq j, T}, \quad \dots \quad \text{Ec.10.57}$$

$$\Delta \delta_i = \frac{1}{\delta_{mix}} \left[ \frac{\partial n \delta_{mix}}{\partial n_i} \right]_{n_i \neq j, T}, \quad \Delta \epsilon_i = \frac{1}{\epsilon_{mix}} \left[ \frac{\partial n \epsilon_{mix}}{\partial n_i} \right]_{n_i \neq j, T}.$$

### 10.7 Solución a problemas flash de un componente puro

En la solución de este problema se aplican sistemas simultáneos de ecuaciones no-lineales, por lo que normalmente se utilizan dos tipos de métodos:

1. Derivados de algoritmos tipo sustituciones sucesivas.
2. Derivados de algoritmos tipo Newton.

El método más popular y fácil de implementar, es el de sustituciones sucesivas. Sin embargo, puede resultar lento en algunas condiciones de interés. En estos casos, puede optarse por el método de Newton-Raphson (que posee una mejor tasa de convergencia) o implementar un procedimiento para acelerar la convergencia de las sustituciones.

El método de Newton requiere definir una o más funciones objetivo, así como obtener sus respectivas funciones derivadas. Además, requiere de un muy buen estimado (suficientemente cercano a la solución real) para garantizar la convergencia. Esto no siempre es posible, especialmente al inicio del procedimiento.

Pese a sus diferencias, el procedimiento general para un cálculo flash de un sistema puede describirse de acuerdo con la Figura 10.15. A continuación, se presentan los algoritmos de sustituciones sucesivas y de Newton-Raphson aplicados a la solución de problemas para componentes puros.

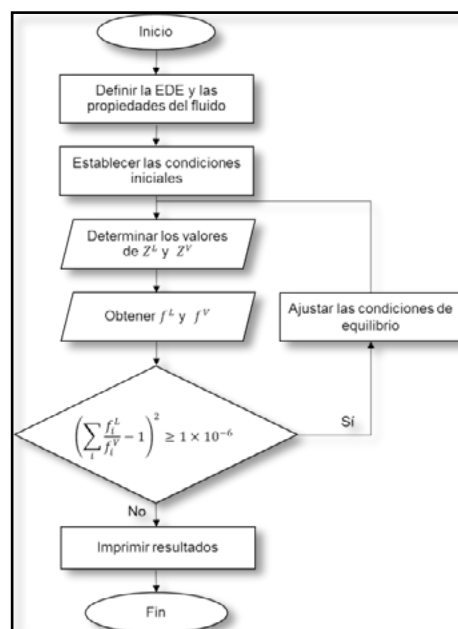


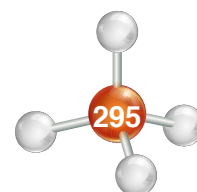
Figura 10.15. Proceso general para un cálculo flash utilizando una ecuación de estado.

#### 10.7.1 Método de sustituciones sucesivas

Como en todos los métodos iterativos, en los métodos de sustitución se inicia con un supuesto inicial para todas las variables y se hace un ciclo a través de las ecuaciones para mejorar las aproximaciones. Al finalizar los cálculos, se prueba la validez de la solución comparándola con la anterior, y si se cumplen los criterios de convergencia, el proceso se detiene y se utiliza el último resultado como respuesta al problema. En este caso, a condiciones de equilibrio se tiene:

$$\frac{f^L}{f^V} = 1, \quad \dots \quad \text{Ec.10.58}$$

No obstante, dado que en un proceso iterativo puede ocurrir que las fugacidades no sean iguales a lo largo de la trayectoria, la razón de fugacidades en realidad es:





$$\frac{f^L}{f^V} = \frac{f^L}{\phi^V p} \quad \dots\dots\dots \text{Ec.10.59}$$

Si se asume que las condiciones de equilibrio se alcanzan en el nivel de iteración  $m + 1$ , y se evalúa a  $f$  y  $\phi$  en el nivel  $m$ , la combinación de las Ecs. Ec.10.58 y Ec.10.59 permite obtener la siguiente fórmula de iteración para la presión:

$$(p)^{m+1} = \left(\frac{f^L}{\phi^V}\right)^m \quad \dots\dots\dots \text{Ec.10.60}$$

y, usando la Ec. Ec.10.58, puede establecerse como regla para definir la convergencia:

$$\left(\frac{f^L}{f^V} - 1\right)^2 < \xi \sim 1 \times 10^{-8} \quad \dots\dots\dots \text{Ec.10.61}$$

De esta manera, el algoritmo de solución para encontrar la presión a la que coexisten las fases es el siguiente:

1. Elegir la EDE a utilizar y definir al fluido.
2. Proponer un conjunto de valores iniciales  $\alpha\{p, T\}$ .
3. Resolver la Ec. Ec.10.44. En caso de existir más de una solución real, elegir la de valor mayor para el vapor ( $Z^V$ ) y la de menor para el líquido ( $Z^L$ ).
4. Evaluar el conjunto de variables dependientes  $\{\phi^V, \phi^L, f^V, f^L\}$  utilizando las raíces correspondientes.
5. Evaluar la Ec. Ec.10.61.
  - a. Si el resultado es mayor que  $\xi$ , evaluar la Ec. Ec.10.60 y reevaluar el punto 3.
  - b. Si el resultado es menor que  $\xi$  pasar al punto 6.
6. Imprimir resultados.

Para construir el diagrama de la presión de vapor completo, se repite el proceso a una temperatura mayor hasta el punto crítico y para inicializar el problema, ahora se utiliza el último punto de presión de las condiciones de equilibrio conocidas.

### 10.7.2 Método de Newton-Raphson de una variable

El método de Newton-Raphson requiere de un estimado inicial particularmente cercano a la solución real para converger, pero una vez que es proporcionado, garantiza una tasa de convergencia mayor al de sustituciones sucesivas. Para su uso, debe plantearse una función objetivo  $g(p)$ , que para este caso se propone:

$$g(p) = \ln \left| \frac{f^L}{f^V} \right| = \ln \left| \frac{\phi^L}{\phi^V} \right| = 0 \quad \dots\dots\dots \text{Ec.10.62}$$

la cual es válida a condiciones de equilibrio. Y puesto que se busca conocer la presión de vapor a una temperatura dada, la formula iterativa resulta en:

$$p^{m+1} = p^m - \frac{g(p^m)}{g'(p^m)} = p^m - \frac{\ln|\phi^L(p^m)| - \ln|\phi^V(p^m)|}{\frac{\partial}{\partial p} (\ln|\phi^L(p^m)| - \ln|\phi^V(p^m)|)} \quad \dots\dots\dots \text{Ec.10.63}$$

y puede definirse la siguiente regla de convergencia:

$$|g(p)| \xi \sim 1 \times 10^{-4} \quad \dots\dots\dots \text{Ec.10.64}$$

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

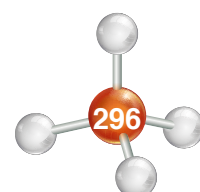
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





De esta manera, el algoritmo de solución para encontrar la presión a la que coexisten las fases es el siguiente:

1. Elegir la EDE que se va a utilizar y definir el componente de interés.
2. Proponer un conjunto de valores iniciales  $\alpha\{p, T\}$ .
3. Resolver la Ec. Ec.10.44. En caso de existir más de una solución real, elegir el valor mayor para el vapor ( $Z^V$ ) y el menor para el líquido ( $Z^L$ ).
4. Evaluar el conjunto de variables dependientes  $\{\phi^L, \phi^V, f^L, f^V\}$  utilizando las raíces correspondientes.
5. Evaluar la Ec. Ec.10.64.
  - a. Si el resultado es mayor que  $\xi$ , evaluar la Ec. Ec.10.63 y reevaluar el punto 3.
  - b. Si el resultado es menor que  $\xi$  pasar al punto 6.
6. Imprimir resultados.

La derivada analítica de la Ec. Ec.10.63 es:

$$\frac{\partial \ln \phi}{\partial p} = \frac{\partial Z}{\partial p} + \frac{\partial Z / \partial p - B/p}{B - Z} + \frac{A}{Z + B} (b - 1) \left( \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial p} - \frac{1}{p} \right), \quad \text{Ec.10.65}$$

donde,

$$\frac{\partial Z}{\partial p} = \frac{B(2A + 2BZ + Z) - AZ}{p(3Z^2 - 2Z + A - B - B^2)}. \quad \text{Ec.10.66}$$

### 10.8 Solución a problemas flash en sistemas multicomponente

La solución a estos problemas puede abordarse como se describe en la Figura 10.15, por lo que el procedimiento es similar al caso de un componente puro, únicamente añadiendo las incógnitas de las composiciones del líquido y el vapor, así como de sus respectivas proporciones molares. Además, dado que el comportamiento del sistema obedece a la interacción promedio de las variables, se tendrán diferentes condiciones de saturación en el diagrama  $p - T$  en función de los valores de  $F_V$  y  $F_L$  que se va a describir.

Las composiciones iniciales del líquido y el vapor pueden ser definidas con ayuda de la composición total y las constantes de equilibrio, cuyos valores pueden ser suministrados de mediciones experimentales o estimarse con la correlación de Wilson como:

$$K_i = \frac{p_{c_i}}{p} \times \exp \left[ 5.37(1 + \omega_i) \left( 1 - \frac{T_{c_i}}{T} \right) \right]. \quad \text{Ec.10.67}$$

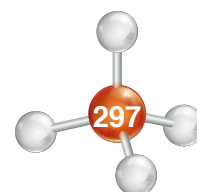
Los siguientes son algunos algoritmos útiles para la solución de este problema en sistemas multicomponente.

#### 10.8.1 Método de sustituciones sucesivas

En este caso se establecen las siguientes condiciones de equilibrio:

$$\sum_i \frac{f_i^L}{f_i^V} = \sum_i \frac{f_i^L}{\phi_i^V p}, \quad \text{Ec.10.68}$$

con lo que la fórmula iterativa para la presión puede obtenerse evaluando a  $f$  y  $\phi$  en el nivel  $m$  y asumiendo que se las condiciones de equilibrio se alcanzan en el nivel de iteración  $m + 1$ , como:





$$(p)^{m+1} = \sum_i \left( \frac{f_i^L}{\phi_i^V} \right)^m \dots \dots \dots \text{Ec.10.69}$$

con lo que la regla de convergencia resulta:

$$\left( \sum_i \frac{f_i^L}{\phi_i^V} - 1 \right)^2 < \xi \dots \dots \dots \text{Ec.10.70}$$

Adicionalmente, las constantes de equilibrio pueden recalcularse como:

$$K_i^{m+1} = K_i^m \frac{f_i^L}{f_i^V} \dots \dots \dots \text{Ec.10.71}$$

De esta manera, el algoritmo de solución para encontrar la presión a la que coexisten las fases es el siguiente:

1. Elegir la EDE que se va a utilizar y definir al fluido con las propiedades de la mezcla y las proporciones molares de interés.
2. Proponer un conjunto de valores iniciales  $\alpha\{p, T, K_i\}$ .
3. Resolver la Ec. Ec.10.44 con las propiedades promedio de la mezcla. En caso de existir más de una solución real, elegir la solución que cumpla con los criterios de estabilidad o considerar que la raíz mayor se usará para el vapor ( $Z^V$ ) y la menor para el líquido ( $Z^L$ ).
4. Evaluar el conjunto de variables dependientes  $\{\phi_i^V, \phi_i^L, f_i^V, f_i^L\}$  utilizando las raíces correspondientes.
5. Evaluar la Ec. Ec.10.70.
  - a. Si el resultado es mayor que  $\xi$ , evaluar las Ecs. Ec.10.69 y Ec.10.30, y reevaluar el punto.
  - b. Si el resultado es menor que  $\xi$  pasar al punto 6.
6. Imprimir resultados.
- 7.

### 10.8.2 Método de Newton-Raphson

Para este proceso se definen los vectores  $\alpha$ , cuya solución describe un punto de la envolvente, y  $\beta$ , que indica las especificaciones del problema, como:

$$\alpha = (K_1, K_2, \dots, K_N, T, p), \dots \dots \dots \text{Ec.10.72}$$

$$\beta = (X_1^T, X_2^T, \dots, X_N^T, F_V), \dots \dots \dots \text{Ec.10.73}$$

con lo que las restricciones de fugacidad y de composición (las ecuaciones de Rachford-Rice) establecidas para las condiciones de equilibrio, pueden ser expresadas a través de un vector objetivo  $g$  como:

$$g_i(\alpha, \beta) = f_i^V(\alpha, \beta) - f_i^L(\alpha, \beta) = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n, \dots \dots \dots \text{Ec.10.74}$$

$$g_{n+1}(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^n [X_1^V(\alpha, \beta) - X_1^L(\alpha, \beta)] \dots \dots \dots \text{Ec.10.75}$$

De esta manera, para obtener una solución particular, se agrega una restricción adicional a  $g$  en términos de las variables independientes ( $\delta$ ) como

$$g_{n+2}(\alpha, \beta) = \alpha_k - \delta = 0, \dots \dots \dots \text{Ec.10.76}$$

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

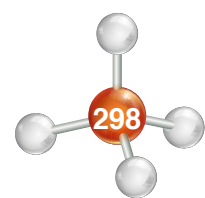
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22







y se propone un estimado inicial del vector solución  $\alpha^{(m)}$ , del que se podrá tener un mejor estimado de la siguiente formula iterativa:

$$\alpha^{(m+1)} = \alpha^{(m)} - [J^{(m)}]^{-1} g^{(m)}, \quad \dots\dots\dots \text{Ec.10.77}$$

donde  $J$  es la matriz Jacobiana evaluada en  $\alpha^{(m)}$ . El algoritmo de solución para encontrar las condiciones a las que coexisten las fases es el siguiente:

1. Elegir la EDE a utilizar y definir al vector  $\beta$  para el fluido de interés.
2. Proponer un conjunto de valores iniciales  $\alpha^m$ .
3. Resolver la Ec. Ec.10.44. En caso de existir más de una solución real, elegir la que asegure la estabilidad de las fases estudiadas, o usar el valor mayor para el vapor ( $Z^V$ ) y el menor para el líquido ( $Z^L$ ).
4. Evaluar el conjunto de variables dependientes  $\{\phi^L, \phi^V, f^L, f^V\}$  utilizando las raíces correspondientes.
5. Evaluar  $g(\alpha, \beta)$  considerando una tolerancia  $\xi$ ,
  - a. Si el resultado es mayor que  $\xi$ , evaluar la Ec. Ec.10.77 y reevaluar el punto 3.
  - b. Si el resultado es menor que  $\xi$  pasar al punto 6.
6. Imprimir resultados.

Nota: En el apéndice B, se describe la clasificación de los fluidos petroleros de acuerdo con sus fases.

## 10.9 Autoevaluación

### Cuestionario de autoevaluación Capítulo 10

Instrucciones: Lee atentamente cada una de las cuestiones siguientes y subraya la respuesta correcta.

1. Porción del Universo que se encuentra constituido por uno o más componentes que se relacionan entre sí.
 

a) Sistemas	b) Alrededores	c) Fase
-------------	----------------	---------
2. Tipo de sistema en el cual se transfiere energía y materia con los alrededores.
 

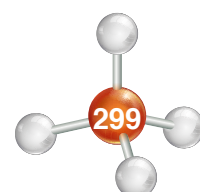
a) Abierto	b) Cerrado	c) Aislado
------------	------------	------------
3. Sistema en el cual no hay intercambio de materia ni energía con los alrededores.
 

a) Abierto	b) Cerrado	c) Aislado
------------	------------	------------
4. Denominación de las propiedades cuyo valor depende de la cantidad de materia:
 

a) Intensivas	b) Extensivas	c) Específicas
---------------	---------------	----------------
5. Cantidad de energía presente en un cuerpo, en función de su nivel de agitación molecular.
 

a) Masa	b) Presión	c) Temperatura
---------	------------	----------------
6. Aceleración con la que un planeta atrae una masa hacia su centro.
 

a) Densidad	b) Peso	c) Masa
-------------	---------	---------







CASOS DE  
APLICACIÓN  
Y TEMAS  
SELECTOS







# Capítulo 11

## La Química y los lodos de perforación

Javier Arellano Gil, Ana Laura Pérez Martínez, Alan Sebastian Rivera Rodríguez, Raúl Rubí Villegas y Fanny Astrid Barragán Gasca

### 11.1 Introducción

La creciente demanda de energía en el mundo moderno ha incentivado el desarrollo de nuevas tecnologías para mejorar la búsqueda y explotación eficiente de yacimientos de hidrocarburos, con los que se contribuye a satisfacer la demanda de todos los países, ya que los hidrocarburos (convencionales y no convencionales<sup>7</sup>) continúan siendo la principal fuente de energía y materia prima para múltiples productos industriales.

En los procesos de exploración y explotación de yacimientos petroleros, la perforación de pozos es fundamental, por lo que se debe de utilizar la mejor tecnología y los lodos de perforación químicamente adecuados, que circulen en el interior del pozo, que pasen a través de la barrena y que sean capaces de regresar a la superficie por el *espacio anular* (espacio entre el exterior de la tubería de perforación y el interior del agujero o de la tubería de revestimiento), con los recortes de la roca.

Perforar un pozo genera recortes de la formación, que corresponden a fragmentos de roca con una composición química distintiva, principalmente de rocas sedimentarias cuando son pozos petroleros. Su tamaño y cantidad varía, según sea la barrena, la velocidad de penetración y el tipo de roca que se esté cortando. El lodo, junto con el caudal de bombeo, debe ser capaz de acarrear los recortes a la superficie dejando limpio el fondo del pozo, además de lubricar y enfriar a la barrena. Otro objetivo fundamental de los lodos de perforación es el de controlar las presiones de los fluidos, ya que toda formación en el subsuelo tiene una determinada presión en sus poros (*presión de formación*), por lo que el lodo debe tener una composición química que le proporcione mayor densidad y que, junto con el volumen, controle la salida de fluidos en el pozo.

<sup>7</sup> Hidrocarburos convencionales. Son los que se encuentran en yacimientos petroleros (aceite o gas) en el subsuelo dentro de rocas porosas y permeables en una trampa petrolera, los que se explotan con uno o varios pozos utilizando la energía natural del yacimiento.

Hidrocarburos no convencionales. Son los que se encuentran en rocas del subsuelo (aceite o gas) dentro de secuencias impermeables o que no fluyen al no tener presión natural, por lo que para su explotación se tiene que realizar fracturamiento u otra técnica que permita que los fluidos se movilen y puedan ser recuperados.

### Sumario

#### 11.1 Introducción

#### 11.2 Importancia y utilidad de los lodos de perforación

#### 11.3 Teoría básica de las emulsiones

#### 11.4 Tipos de lodos de perforación

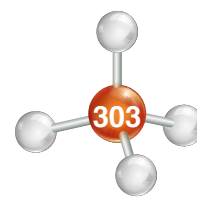
#### 11.5 Fases de los lodos de perforación

#### 11.6 Componentes de los lodos de perforación

#### 11.7 Propiedades químicas de los lodos

#### 11.8 Fluidos de perforación para realizar fracturamiento (fracking) y los apuntalantes (proppants)

#### 11.9 Conclusiones







En este capítulo se trata lo referente a las propiedades químicas de los lodos de perforación, considerando la teoría básica de las emulsiones, las fases y sus principales componentes: arcillas, agentes densificantes y polímeros.

## 11.2 Importancia y utilidad de los lodos de perforación

La importancia y la utilidad de los lodos de perforación radica en el hecho de que siempre son utilizados cuando se perforan pozos petroleros, pozos de agua potable, pozos de inyección y pozos geotérmicos, tanto de exploración como de desarrollo. Las siguientes son algunas de las aplicaciones más importantes:

- **Sustraer los recortes de la formación hasta la superficie.**

La perforación de un pozo produce recortes en la formación, cuya cantidad, tamaño, y características están de acuerdo con el tipo de roca, el tipo de barrena, velocidad de penetración, etc. La remoción del recorte debe llevarse a cabo de manera continua para que se deje a la barrena con el espacio suficiente para que pueda llevar a cabo su función de hacer la penetración de forma continua; el lodo, junto con el caudal de bombeo, debe ser capaz de acarrear dichos recortes a la superficie, para dejar limpio el fondo del pozo.

- **Controlar las presiones de la formación.**

Toda formación en el subsuelo tiene una determinada presión en sus poros, a la que se le denomina *presión de poro* o *presión de formación*. Si se conoce la profundidad de la perforación, se puede determinar la densidad mínima que debe de tener el lodo para que se pueda controlar esa presión, sobretodo, cuando hay presencia de gas, aceite y vapor de agua o de otros fluidos. Para que se incremente la densidad de los lodos de perforación, la industria petrolera utiliza una gran variedad de productos químicos, de los cuales, los más usados son la baritina, el cloruro de sodio, el óxido de hierro, el cloruro de potasio y el carbonato de calcio.

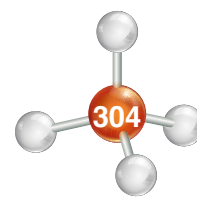
- **Estabilizar las paredes de la formación.**

Las formaciones que son atravesadas varían en litología y en sus características fisicoquímicas, según sea la profundidad en la que se encuentren, así como de su posición estratigráfica, la cantidad y tipos de fluidos presentes. La estabilidad de la formación dependerá de sus características litológicas, así como de la profundidad y de las condiciones con las que se esté perforando; también depende de las reacciones químicas del lodo con la formación. En gran medida, la estabilidad de la formación depende de la química de los lodos de perforación.

## 11.3 Teoría básica de las emulsiones

Las emulsiones son representadas como la dispersión de un líquido miscible en otro, que es inmisible, o viceversa. Un ejemplo de este caso es el aceite en agua, o el agua que se encuentra contenida en el aceite. El primer caso ocurre cuando la fase continua es agua y la fase dispersa o interna es el aceite. Cuando se logra la unión de las burbujas que se encuentran contenidas en el aceite, se dice que hay una emulsión de agua que se encuentra contenida en el aceite (*fase dispersa en el agua*). Se han realizado diversos estudios para lograr una película interfacial, la cual aporta mayor estabilidad a la emulsión, ya que tiene mayor resistencia y mejor compatibilidad con los lodos de perforación.

En la mayoría de las emulsiones, el aceite se presenta como la fase dispersa y el agua como la fase continua. Sin embargo, en las emulsiones inversas el agua representa la fase dispersa; esto es posible porque se utiliza un emulsificante adecuado que tiene la capacidad para lograr que las partículas dispersas vuelvan a juntarse y formar una fase. De esa manera puede reducir la tensión





interfacial, proporcionando gran estabilidad a la emulsión. Para lograr este cometido, el emulsificador debe presentar gradualmente una película de agua que se encuentre alrededor de las gotas y que tenga las características de fuerza y vigorosidad (McCray Arthur V. & Cole Frank, 2011).

En otras emulsiones las gotas tienden a estabilizarse gracias a los iones existentes en la disolución; ocurre entonces, un proceso de absorción. El resultado es que las partículas que se encuentran cargadas eléctricamente se hallan en repulsión entre unas y otras se estabilizan a causa del fenómeno de ionización. La formación de la emulsión: aceite en el agua (fase directa), o agua en el aceite (fase inversa), se debe, fundamentalmente, a la solubilidad relativa del emulsificante presente entre las 2 fases. Para que esto ocurra, se puede utilizar un surfactante soluble en agua, como el oleato de sodio (Figura 11.1). Se formará, así, una emulsión directa que reduce la tensión interfacial observable en los lodos de perforación (en el lado de la interfase se encuentra el agua, presentada como la interface: aceite/agua). La interfase presenta una figura curvada, en la que se tiene a la gota de aceite rodeada por el agua. También se pueden emplear oleatos de calcio y magnesio, solubles en aceite, pero no en agua. Con esta combinación se obtienen emulsiones inversas.



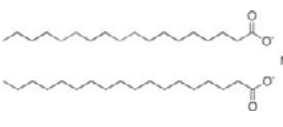
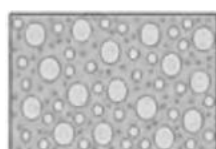
Emulsificante		Tipo de emulsión	
Nombre	Estructura	Nombre	Esquema
Oleato de sodio		Directa Fase dispersa: gota de aceite Fase continua: agua	
Oleato de calcio o magnesio		Inversa Fase dispersa: agua Fase continua: gota de aceite	

Figura 11.1. Emulsificantes oleatos de sodio y oleato de calcio o magnesio. (Modificada de <http://www.fcen.unp.edu.ar/sitio/tecnofarma/wp-content/uploads/2010/0-4/Emulsiones.pdf>)

Existe una gran variedad de emulsificantes que tienen mayor aplicación en los lodos de perforación base agua. Estos son: ácidos grasos, ésteres y éteres (sulfonatos y sulfatos).

### 11.4 Tipos de lodos de perforación

Los lodos de perforación se dividen en tres grandes grupos: *neumáticos*, *base agua* y *base aceite*. Los más utilizados en la industria petrolera son los lodos base agua y los lodos base aceite.

#### 11.4.1 Neumáticos

Son aquellos lodos utilizados en situaciones en las que la perforación con fluidos líquidos no es la adecuada. Nos referimos a la perforación en formaciones muy porosas o presurizadas. Estos lodos incluyen aire, espumas y lodos aerados.

#### 11.4.2 Lodos base agua

Estos son lodos en los que el agua dulce o el agua salada son la fase líquida principal, además de ser la *fase mojante* o *externa*. Sus categorías generales son: agua dulce, agua de mar, cal, potasio y silicato. Sus componentes principales: agua, barita ( $BaSO_4$ ) y *bentonita* (término sugerido por primera vez por Knight en 1898), para un material arcilloso con propiedades jabonosas procedente



de la Formación Geológica "Benton Shale", que aflora en las inmediaciones de Wyoming, USA. La bentonita es una roca compuesta por más de un tipo de minerales, aunque son las esmectitas sus constituyentes esenciales y las que le confieren sus propiedades características. Las esmectitas poseen una estructura cristalina de tres capas: una de alúmina y dos de sílice (Figura 11.2) y registran hinchamiento por hidratación cuando se exponen al agua (Schlumberger, 2017).

### 11.4.3 Lodos base aceite

Son aquéllos cuya fase continua o externa corresponde a petróleo crudo o componentes extraídos de éste. Sus propiedades se encuentran influenciadas por la relación aceite/agua, el tipo de emulsificador, la concentración y el contenido de los sólidos. Estos lodos constituyen una emulsión de agua en aceite, es decir, una emulsión inversa donde la fase dispersa es el agua y la fase continua, al igual que el filtrado, es el aceite (García-Hernández, 2014).

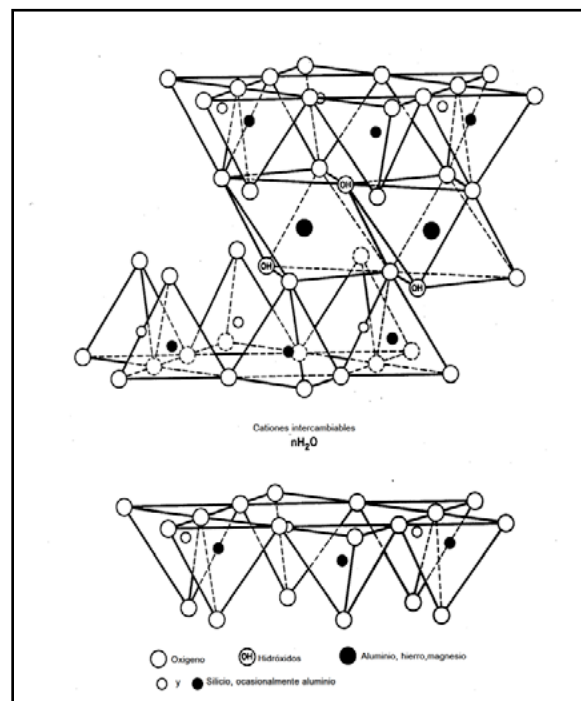


Figura 11.2. Estructura de un mineral de arcilla tipo esmectita. ([http://bibliotecadigital.ilce.edu.-mx/sites/ciencia/volumen3/ciencia3/109/html/sec\\_6.html](http://bibliotecadigital.ilce.edu.-mx/sites/ciencia/volumen3/ciencia3/109/html/sec_6.html)).

## 11.5 Fases de los lodos de perforación

La muy diversa composición química de lodos de perforación se justifica por la gran variedad de casos que enfrentan los profesionales al perforar un pozo petrolero en diversas condiciones geológicas y con fluidos con diferentes propiedades. De ahí la importancia del manejo de la información relativa a sus propiedades y de sus posibles aplicaciones.

### 11.5.1 Fases de los lodos

Un lodo de perforación es una combinación de sólidos, líquidos y gases contenidos en otro líquido. Todos estos materiales se encuentran suspendidos y representan la *fase continua* del lodo. Las partículas sólidas o glóbulos líquidos suspendidos constituyen la *fase discontinua*. El agua es la fase continua y las arcillas son la fase discontinua o interna, en los lodos constituidos principalmente por agua y arcillas. En caso de que haya una emulsión inversa, el petróleo es la fase continua y los glóbulos contenidos en el agua son la fase discontinua. El aumento en la concentración de la fase continua tiende a adelgazar a los lodos de perforación, mientras que el filtrado proviene, en su mayor parte, de la fase continua. El revoque se forma a partir de la fase discontinua. La fase continua de un lodo siempre es líquida; en cambio en la fase discontinua se pueden hallar sólidos, líquidos y gases (Benítez-Hernández, Garaicochea-Petirena & Reyes-Álvarez, 1979).

#### 11.5.1.1 Fase continua de los lodos

La fase continua de un lodo de perforación base agua, es siempre agua, en conjunto con las sales disueltas en ella. Estas son principalmente, los cationes  $\text{Na}^+$  (sodio) y  $\text{Ca}^{2+}$  (calcio) y el anión  $\text{OH}^-$  (oxhidrilo). Si la concentración de los iones  $\text{Na}^+$  o  $\text{Ca}^{2+}$  es demasiado alta, tienden a provocar una inhibición de la hidratación de las arcillas añadidas al lodo. Por otra parte, si esos cationes entran



en la fase continua de un lodo en el cual las arcillas ya se encuentran hidratadas, se produce una floculación instantánea. Posteriormente se lleva a cabo la deshidratación de las arcillas. Los cationes  $K^+$  (potasio) y  $NH_4^+$  (amonio), son añadidos deliberadamente a la fase continua de ciertos lodos, produciendo resultados muy similares.

### 11.5.1.2 Fase discontinua de los lodos

En la fase discontinua, los glóbulos de petróleo que se encuentran emulsionados en un lodo base agua tienden a viscosificarlo y a reducir su densidad. El petróleo del lodo puede ser añadido desde la superficie o aportado por las formaciones perforadas. Cuando existen cantidades significativas, se trata de petróleo añadido deliberadamente para reducir la fricción mecánica, para reducir la filtración a través de las paredes o para liberar tubería aprisionada por el efecto de la presión diferencial. El agua emulsionada en un lodo base aceite se hace más viscoso, por lo que la proporción petróleo/agua en un lodo base aceite debe ser cuidadosamente controlada. La entrada de agua a la formación en este tipo de lodos los hace más viscosos y, si es abundante, desestabilizará la fase discontinua.

### 11.5.1.3 Fase sólida de los lodos

Los sólidos juegan un papel muy importante en la composición, mantenimiento y densidad de los lodos. Se les asigna una fase aparte, aún cuando todas las partículas sólidas pertenecen a su fase discontinua. La inestabilidad de los lodos de perforación aumenta en la medida que el porcentaje de sólidos (en volumen) se eleva. Los diversos tratamientos químicos pueden incrementar la capacidad de un lodo para tolerar sólidos, pero sólo hasta cierto punto. Los sólidos que se hidratan o que tienen numerosas cargas eléctricas de superficie expuestas, se denominan *sólidos activos en los lodos base agua*. Otros, como la barita, son prácticamente inertes. La mayoría de los sólidos (con excepción de algunos aditivos especializados de lodos base aceite), son inertes también. Cuando el nivel total de sólidos no es excesivo puede contener un exceso de sólidos activos.

## 11.6 Componentes de los lodos de perforación

Además de agua y/o aceite, los lodos de perforación utilizan los siguientes materiales o compuestos:

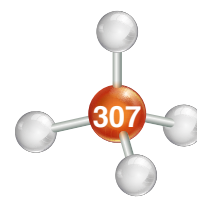
### 11.6.1 Arcillas

Las arcillas son sedimentos finos que se encuentran, principalmente, en rocas sedimentarias o en sedimentos derivados de rocas ígneas, compuestos por una gran variedad de partículas de minerales laminares formados, sobre todo, por silicatos aluminicos hidratados. La arcilla más utilizada en los lodos de perforación es la montmorillonita, comunmente llamada *bentonita* (McCray, A. & Cole, F., 2011).

Las principales arcillas empleadas en la industria petrolera son:

- Arcillas en forma de aguja no hinchables: atapulguita y sepiolita.
- Arcillas laminares no hinchables: illita, clorita y la caolinita.
- Arcillas laminares muy hinchables: montmorillonita sódica (bentonita).

Químicamente hablando, las arcillas pueden clasificarse como silicatos de aluminio. Desde el punto de vista físico, las arcillas son descritas como una mezcla heterogénea de minerales que se encuentran finamente divididos (2 micrones o menos): cuarzo, feldespato, calcita, piritita y otros materiales sedimentarios compuestos, principalmente, por sílice, aluminio y agua. Como los elementos que constituyen a las arcillas forman el 82% de la masa de la Tierra (aproximadamente,







8.1% de aluminio, 27.7% de sílice y 46.6% de oxígeno), es comprensible que en la mayoría de las formaciones que se perforan, haya minerales de arcillas que en algunos casos son los materiales que predominan en las formaciones geológicas. El tipo y la cantidad de minerales presentes son factores muy significativos en las propiedades mecánicas y químicas de la roca.

La selección de los fluidos de perforación debe prever posibles reacciones de los lodos con la formación, puesto que estas reacciones tienen un fuerte impacto en la estabilidad del agujero. La mayoría de los yacimientos ubicados en areniscas contienen determinada cantidad de minerales de arcillas, los cuales pueden reaccionar con los lodos que los van a contactar de manera tal que, de no tomar las previsiones necesarias, los pueden bloquear parcial o totalmente, reduciendo la productividad de hidrocarburos en los pozos de un yacimiento. Los yacimientos en carbonatos también pueden contener arcillas, aunque en general, en menor volumen que en secuencias terrígenas.

Los sólidos arcillosos son agregados a los lodos de perforación aplicados con el propósito de incrementar y controlar su viscosidad. Existen arcillas comerciales como la bentonita y la atapulgita, las que son mayormente utilizadas para obtener las propiedades de flujo deseadas.

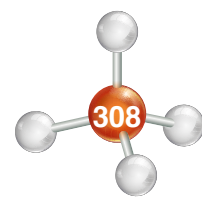
Ocasionalmente, la combinación de arcillas comerciales y procedentes de la formación propician viscosidades muy altas. En estos casos el sistema debe ser tratado con productos químicos denominados *dispersantes* y *adelgazantes*. Entender cabalmente la química de estos aditivos permite tomar las medidas más acertadas para lograr las propiedades que se requieren de los lodos de perforación (Gray, R. G. y Darley H., 1980).

### 11.6.2 Agentes densificantes

Estos agentes son materiales sólidos de alta densidad que, finamente divididos, son utilizados para aumentar la densidad de los lodos de perforación. El agente densificante más importante es la barita, seguida por las sales solubles. La saturación con cloruro de sodio (sal común) aumenta la densidad del agua a 10 lbm/gal (*ppg*), en cambio, si la saturación se lleva a cabo con cloruro de calcio la densidad lograda será de 11.8 *ppg*. Utilizando otros productos químicos se pueden alcanzar densidades de 16 *ppg* como ocurre con el cloruro de zinc o con bromuro de calcio. La ventaja del uso de sales solubles como agentes densificantes radica en que, al aumentar la densidad, se logra un alto contenido de sólidos en los lodos de perforación.

### 11.6.3 Polímeros

Los *polímeros* son macromoléculas, generalmente orgánicas, que se forman con la unión de pequeñas moléculas denominados *monómeros*. También son entendidos como materiales integrados por moléculas estructuradas por unidades constitucionales que se repiten de una manera ordenada. Este término abarca una amplia gama de compuestos o sustancias químicas, algunas de las cuales existen en la naturaleza y otras más son productos de forma sintética obtenidos en procesos de laboratorio. En el contexto de los lodos de perforación, los polímeros son compuestos orgánicos que, en cantidades muy pequeñas, propician aumentos muy significativos en su viscosidad o que proporcionan un excelente control para la pérdida del filtrado en las zonas productoras; también han sido utilizados para encapsular a los lodos de perforación, inhibiendo la hidratación de los sólidos presentes o para flocular a los sólidos de menor tamaño o que presentan partículas muy pequeñas en la línea de descarga. Los polímeros son materiales muy importantes en el control de la fase sólida de los lodos de perforación. Los más utilizados como componentes de los lodos de perforación son:







- **Polímero XC**

Este compuesto posee características muy peculiares en su manufactura: su composición se debe a una fragmentación bacteriana que origina incremento en su viscosidad al contacto con el agua. Asimismo, presenta salinidades muy variables.

- **Celulosa drispac**

La celulosa drispac es un material cuya función principal consiste en reducir la pérdida de agua en los distintos lodos de perforación de agua salada o de agua dulce; también proporciona una gran viscosidad a estos sistemas.

- **Carboximetil celulosa**

Es un reductor de pérdida de agua, ya que proporciona una gran viscosidad a los lodos de perforación, sobre todo a los de agua dulce y a los de agua salada que se encuentren cercanos o muy por encima de las 50,000 ppm de cloro.

## 11.7 Propiedades químicas de los lodos

### 11.7.1 pH y control de la alcalinidad

La determinación y mantenimiento de los valores correctos del *potencial de hidrógeno* (pH) tienen gran relevancia en cuanto a la formulación de los lodos de perforación. Dicho mantenimiento de los valores del pH genera un impacto directo sobre las propiedades de los lodos de perforación. Recordemos que el pH es una medida del grado de acidez o de alcalinidad que presenta una disolución acuosa y que su dimensión numérica varía entre 0 y 14 (Figura 11.3); los valores bajos son ácidos, mientras que los valores altos, son alcalinos. Una disolución que presenta un pH de 7 es considerada neutra.



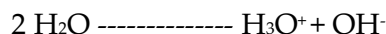
El pH se determina con el logaritmo negativo de la concentración del ion hidrógeno. Su ecuación es la siguiente:

$$\text{pH} = -\log [\text{H}^+]$$

Si tenemos un ácido fuerte con una molaridad de 0,01M, el pH de la disolución será de 2; ya que:

$$\begin{aligned} \text{pH} &= -\log 10^{-2} \\ \text{pH} &= 2 \end{aligned}$$

La escala del pH está basada en la constante de la disociación del agua (cabe resaltar que en el agua destilada hay pocas moléculas que reaccionan una con la otra para formar iones, lo cual determinará las propiedades ácidas). Las propiedades básicas se encuentran conformadas por el ion OH<sup>-</sup>. El siguiente planteamiento describe la relación:



El producto de las concentraciones es denominada *constante de equilibrio para el agua*, aunque también es conocida como *constante de disociación Kw*, donde:

$$\begin{aligned} K_w &= [\text{H}^+] [\text{OH}^-] \\ K_w &= (1 \times 10^{-7})^2 \\ K_w &= (1 \times 10^{-14}) \end{aligned}$$

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

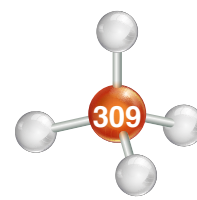
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





En los lodos de perforación base agua, la fase continua es el agua, obviamente. En este medio se puede controlar la concentración de las bases o de los ácidos. El pH en la disolución de una base fuerte, en este caso (NaOH), cuya concentración de iones OH<sup>-</sup> es 10<sup>-2</sup> M, será de:

$$[H^+] = \frac{1 \times 10^{-14}}{1 \times 10^{-2}} M = 1 \times 10^{-12} M$$

$$pH = -\log(1 \times 10^{-12})$$

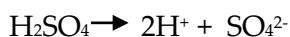
$$pH = 12$$

La tabla 11.1, ilustra la relación entre el valor del pH y las concentraciones de los iones H<sup>+</sup> y OH<sup>-</sup> en una disolución acuosa.

Ya que Kw es constante a cierta temperatura, si la concentración del [H<sup>+</sup>] aumenta, la concentración de [OH<sup>-</sup>] debe disminuir.

### 11.7.2 Alcalinidad

La *alcalinidad* de una disolución debe ser asumida como la concentración que presentan los iones solubles en agua y que neutralizan a los ácidos. Cualquier ion que proporciona un protón H<sup>+</sup> al lodo, actuará como un ácido. Cualquier ion que se combina con un protón es un contribuyente a la alcalinidad. Por ejemplo:



El ácido sulfúrico contribuye con dos protones al agua.



El ion [OH<sup>-</sup>] se combina con el H<sup>+</sup> para formar agua. Contribuye, así, a la alcalinidad.

Los lodos base agua cuentan con tres iones que contribuyen a la alcalinidad:



En estas reacciones, el protón se combina con cada uno de los iones, de manera que cada ion contribuye a la alcalinidad. La alcalinidad y pH se encuentran sumamente relacionados, pero no son lo mismo.

### 11.7.3 Fuentes de alcalinidad

Los compuestos más utilizados para el control de la alcalinidad son:

Sosa cáustica (NaOH)

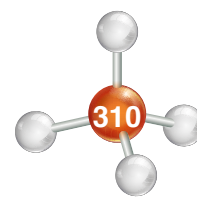
Hidróxido de potasio (KOH)

Hidróxido de calcio o Cal (Ca (OH)<sub>2</sub>)

Todo producto que tienda a contribuir con OH<sup>-</sup> a los lodos de perforación, incrementa el pH del mismo. Los carbonatos se pueden encontrar en la naturaleza en el transcurso de la perforación de un pozo, principalmente en las calizas y dolomías. Muchas veces se pueden encontrar en la forma

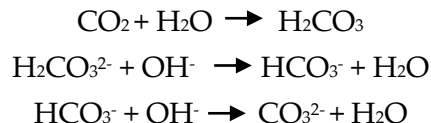
[H <sup>+</sup> ] mol/L	pH	[OH <sup>-</sup> ] mol/L
1 × 10 <sup>0</sup>	0	1 × 10 <sup>-14</sup>
1 × 10 <sup>-1</sup>	1	1 × 10 <sup>-13</sup>
1 × 10 <sup>-2</sup>	2	1 × 10 <sup>-12</sup>
1 × 10 <sup>-3</sup>	3	1 × 10 <sup>-11</sup>
1 × 10 <sup>-4</sup>	4	1 × 10 <sup>-10</sup>
1 × 10 <sup>-5</sup>	5	1 × 10 <sup>-9</sup>
1 × 10 <sup>-6</sup>	6	1 × 10 <sup>-8</sup>
1 × 10 <sup>-7</sup>	7	1 × 10 <sup>-7</sup>
1 × 10 <sup>-8</sup>	8	1 × 10 <sup>-6</sup>
1 × 10 <sup>-9</sup>	9	1 × 10 <sup>-5</sup>
1 × 10 <sup>-10</sup>	10	1 × 10 <sup>-4</sup>
1 × 10 <sup>-11</sup>	11	1 × 10 <sup>-3</sup>
1 × 10 <sup>-12</sup>	12	1 × 10 <sup>-2</sup>
1 × 10 <sup>-13</sup>	13	1 × 10 <sup>-1</sup>
1 × 10 <sup>-14</sup>	14	1 × 10 <sup>0</sup>

Tabla 11.1. Relación entre las [H<sup>+</sup>], [OH<sup>-</sup>] y el pH.





de  $K_2CO_3$  o potasa. Si se presenta un influjo de  $CO_2$  puede inducir al carbonato a que presente la siguiente reacción con el agua:



Finalmente, el  $CO_2$  puede ser generado por la degradación bacteriana de los productos orgánicos de los lodos de perforación. Es pertinente mencionar que estos contienen almidones y diferentes polímeros, sujetos a degradación bacteriana. Otra fuente de  $CO_2$  es el agua que se obtiene de acuíferos en calizas, que en algunos casos se utiliza para la preparación de los lodos. Este fluido debe ser analizado para determinar su contenido de  $CO_2$ . La cantidad de dióxido de carbono ( $CO_2$ ), de carbonato y de bicarbonato presentes en los lodos de perforación, dependen única y exclusivamente del pH que presente el lodo. El rango de los valores del pH a los cuales se detecta el bicarbonato se encuentra entre 7 – 10.30. Cuando se presentan niveles de pH mayores a 10.30 la concentración de los iones de  $OH^-$  es suficientemente alta como para formar una reacción cuyo contenido final será  $CO_3^{2-}$  y agua ( $H_2O$ ).

Los rangos predominantes del pH para los iones presentan la siguiente alcalinidad:

pH 4.3 – 6.3 dióxido de carbono, como un gas en disolución.

pH 6.3 - 10.3 bicarbonato, como un ion en disolución.

pH > 10.3 + carbonato, como ion en disolución.

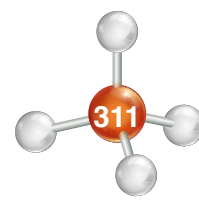
El conocimiento de la relación entre el pH y la alcalinidad es un factor primordial en la determinación de los diferentes contaminantes presentes en los lodos de perforación.

Es prácticamente imposible tener como contaminantes al mismo tiempo al  $CO_2$  y  $HCO_3^-$ , si el pH es de más de 11.5., a esta consideración se le conoce como *verbigracia*. Tampoco es posible que ocurra contaminación de  $CO_3^{2-}$  si el pH es de 8.5 (McCray, A. & Cole F., 2011).

## 11.8 Fluidos de perforación para realizar fracturamiento (*fracking*) y los apuntalantes (*proppants*)

En la perforación de pozos petroleros de yacimientos de hidrocarburos no convencionales, principalmente gas en lutitas, aceite en lutitas, arenas compactas con gas y arenas compactas con aceite, los lodos de perforación que se utilizan son normalmente los mismos que para hidrocarburos convencionales, sin embargo, se debe de considerar que en el caso de aceite o gas en lutitas, el intervalo de interés son las secuencias arcillosas, por lo que en ese intervalo se debe utilizar el lodo de perforación adecuado, comúnmente base aceite, para disminuir los problemas causados por la hidratación de las arcillas. También se debe de tomar en cuenta que los pozos inician verticales, después continúan inclinados menos de  $90^\circ$  y finalmente terminan horizontales u subhorizontales en las zonas o intervalos de cada yacimiento. En estos intervalos, las longitudes son generalmente mayores a 1,000 m, y es donde se debe de realizar a fracturamiento hidráulico (*Hydraulic fracturing*) para que se obtenga la producción de aceite o gas con rendimiento económico (Figura 11.4).

Para lograr que los pozos perforados en yacimientos no convencionales sean altamente productivos, además del fracturamiento hidráulico se debe realizar un diseño óptimo de la





geometría de la fractura y colocar apuntalantes o agentes sustentantes, que eviten que las fracturas generadas se cierren y en consecuencia permitan el flujo continuo de los hidrocarburos hasta la superficie. Los apuntalantes corresponden a partículas sólidas de materiales competentes mecánicamente que se introducen a grandes presiones y a altos gastos a través del pozo hasta la zona del yacimiento junto con los fluidos que originan las fracturas (Chayres-Varela, 2017)

El fracturamiento hidráulico no es una técnica nueva, considerando que se empezó a implementar en la década de 1930, cuando se realizó la perforación del primer pozo horizontal en EE. UU. Posteriormente, en Duncan, Oklahoma, en 1949, se utilizó por primera vez fracturamiento hidráulico con arenas apuntalantes en un pozo fracturado a presión, donde se empleó agua y arena como apuntalante, realizado por la compañía de Haliburton para Stanolind oil Co. A partir de 1950 diversas compañías operadoras han utilizado agua o agua con ácidos como fluido para fracturar las rocas de baja permeabilidad en los intervalos donde se pueden recuperar hidrocarburos en volúmenes que permitan la recuperación de la inversión económica y obtener ganancias (Saxby, 2016).

Los principales componentes que se utilizan en el fracturamiento hidráulico son primordialmente agua (H<sub>2</sub>O) en un 98% y el complemento (2%) son arenas apuntalantes y aditivos (Tabla 11.2). Los aditivos más usados son: cloruro de potasio (KCl), tensoactivos surfactantes, geles, inhibidores, agentes niveladores de pH, espumas, anticorrosivos, ácidos y reductores de fricción (Soliman et al., 2012).

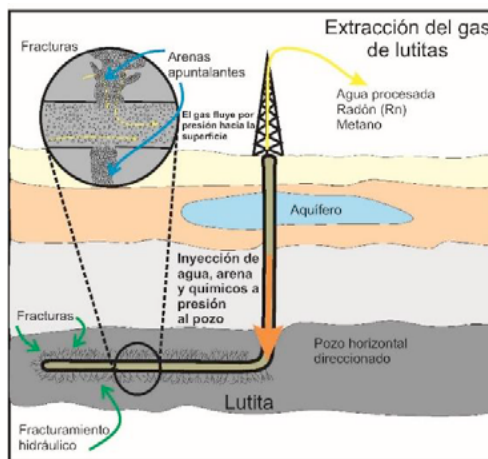
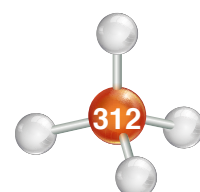


Figura 11.4. Diagrama conceptualizado del proceso del fracturamiento hidráulico y el uso de apuntalantes (Modificada de [www.indianz.com/News/2014/014717.asp](http://www.indianz.com/News/2014/014717.asp).)

Constituyentes	(% por Volumen)	Muestra	Propósito
Agua y arena	99.50	<b>Arena en suspensión</b>	Los granos de arena apuntalante mantienen las microfracturas abiertas
Acido	0.123	<b>Ácido clorhídrico o ácido muriático</b>	Disuelve minerales e inicia las fracturas en la roca
Reductor de fricción	0.088	<b>Poliacrilamida o aceite mineral</b>	Minimiza la fricción entre el fluido y la tubería
Tensoactivo	0.085	<b>Isopropanol</b>	Incrementa la viscosidad del fluido en la fractura
Sal	0.06	<b>Cloruro de potasio</b>	Salmuera como fluido de carga
Inhibidor	0.043	<b>Glicol etileno</b>	Previene las incrustaciones en las tuberías
Agente nivelador del pH	0.011	<b>Carbonato de sodio o potasio</b>	Mantienen la eficacia de los aditivos químicos
Controlador de hierro	0.004	<b>Ácido cítrico</b>	Previene la precipitación de óxidos metálicos
Inhibidor de corrosión	0.002	<b>Acetona formamida</b>	Previene la corrosión de las tuberías
Pesticida	0.001	<b>Glutaraldehído</b>	Minimiza el crecimiento de bacterias que se producen a causa de la corrosión y de los productos tóxicos

Tabla 11.2. Aditivos y apuntalantes para realizar fracturamiento hidráulico.







Para lograr que los pozos perforados en yacimientos no convencionales sean altamente productivos, además del fracturamiento hidráulico se debe realizar un diseño óptimo de la geometría de la fractura y colocar apuntalantes o agentes sustentantes, que eviten que las fracturas generadas se cierren y en consecuencia permitan el flujo continuo de los hidrocarburos hasta la superficie. Los apuntalantes corresponden a partículas sólidas de materiales competentes mecánicamente que se introducen a grandes presiones y a altos gastos a través del pozo hasta la zona del yacimiento junto con los fluidos que originan las fracturas (Chayres-Varela, 2017)

Para la elección de los fluidos y apuntalantes, se debe de considerar el tipo de yacimiento, el tipo de roca, el tipo de hidrocarburos, el volumen, el espesor del intervalo de interés, la presión y la temperatura, entre otros parámetros.

Los apuntalantes (*proppants*), son productos industrializados del tamaño de la arena que se introducen en la zona de fracturas para mantenerlas abiertas, permitiendo la conectividad de los poros hasta el pozo productor facilitando el flujo de los hidrocarburos. Son arenas naturales o elaboradas artificialmente de materiales refractarios, con características químicas especiales que soportan altas presiones y temperaturas, por lo que deben ser de alta resistencia mecánica, buena esfericidad, que dejen espacios intersticiales de tamaño super capilar (adecuada conductividad), que sean de alta durabilidad (que no se erosionen) y de bajo costo.

Los principales apuntalantes son arenas de sílice (99% de  $\text{SiO}_2$ ), arenas revestidas de resina (*resine coat proppants*, RCP) y arenas cerámicas (*ceramic proppants*, CP). Para su elaboración se utiliza bauxita, caolín (>50%  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), caolín bauxítico y bauxita mezclada con caolín. Otros materiales alternativos son silicato de magnesio ( $\text{Mg}_3\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$ ), olivino ( $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$ ), titanita ( $\text{TiO}_2$ ), dunita, andalucita, metabasalto, cenizas principalmente de sílice y alúmina, arcillas ricas en alúmina, vidrio con nanoestructuras cerámicas y escoria metalúrgica. En la Figura 11. 5 se muestran ejemplos de los tres tipos de apuntalantes más utilizados.

## 11.9 Conclusiones

Los lodos son indispensables en la perforación de un pozo petrolero, de agua, de geotermia o de inyección de fluidos, ya que desplazan los recortes de la formación a la superficie dejando limpio el fondo del pozo; controlan también las presiones de la formación evitando brotes o descontrolos, así mismo, lubrican y evitan el calentamiento de la barrena, además de que reducen y prolongan su vida útil.

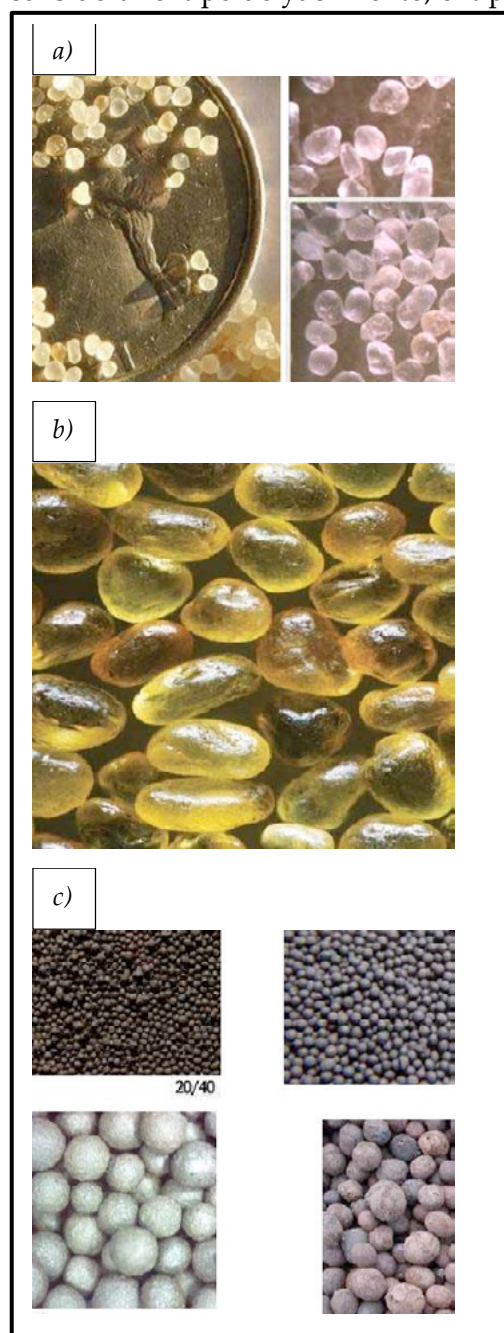


Figura 11.5. Imágenes de los principales apuntalantes del tamaño de arenas. a) arenas de sílice naturales, b) sintéticas revestidas de resina, c) cerámicas industriales (Tomado de Roskill, 2012).





Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

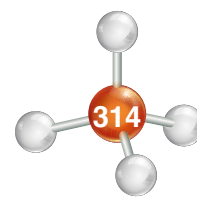
Para perforar pozos petroleros de manera eficaz y eficiente es conveniente aplicar el lodo de perforación adecuado, luego de conocer la composición química de las rocas que van a ser perforadas y de los fluidos que contiene la formación, ya que generan una mezcla de fluidos que circulan en el pozo y que salen a la superficie acarreado los recortes. Pueden ser empleados lodos neumáticos, base agua o base aceite.

La gran variación en la composición química de los lodos de perforación se explica porque cada yacimiento petrolero tiene características fisicoquímicas diferentes, se encuentra a diferente profundidad, diferente temperatura y contiene diversos tipos de rocas. Para cada caso se debe diseñar el lodo de perforación más adecuado que garantice el logro de los objetivos.

El grupo de minerales arcillosos utilizados para elaborar lodos de perforación, están compuestos por silicatos de aluminio, que juegan un papel primordial en la perforación, ya que incrementa la densidad, permite el control de presiones del pozo y contribuye al manejo adecuado del agua de formación.

Los polímeros son sustancias químicas incorporadas a los lodos de perforación con los que se logran aumentos muy significativos en la viscosidad, condición de gran utilidad para la lubricación de la barrena y para un acarreo eficiente de los recortes de la formación cortados por las barrenas.

Para el caso de la perforación de pozos petroleros en yacimientos no convencionales, principalmente de aceite y gas en lutitas, se debe de considerar adicionalmente el uso de fluidos para realizar fracturamiento hidráulico (agua con productos químicos como ácidos) y los apuntalantes correspondientes que eviten que las fracturas se cierren, logrando de esta manera la conductividad del yacimiento con el pozo y en consecuencia, la recuperación de hidrocarburos con volúmenes que hagan rentable su explotación.





# Capítulo 12

## Química y Paleontología

María Patricia Velasco de León, Elizabet Chacón Baca,  
Alejandra Guadalupe Gutiérrez Alejandro

### 12.1 Introducción

En este capítulo se abordará la química de los fósiles, tomando en cuenta que han existido procesos químicos fundamentales entre la biósfera y la geósfera que han coevolucionado a lo largo del tiempo. El papel de los elementos químicos dentro de la paleontología puede abordarse desde el punto de vista biológico y abiótico. Esto depende de si se considera el ensamble y fisiología de los organismos del pasado o bien, sólo se consideran los procesos geológicos más importantes que tienen lugar durante la fosilización y bioerosión. Por ejemplo, los procesos tafonómicos en los que hay descomposición de tejidos, remplazamiento, litificación, etc., que ocurren con intercambio termodinámico de diversos elementos químicos, iones o macromoléculas.

La química de los fósiles que ha influenciado la naturaleza y abundancia del registro paleontológico se pueden resumir en los siguientes tres grandes procesos: La **biomineralización** de esqueletos de acuerdo con el programa genético de cada organismo. En este apartado se comentará sobre los minerales más comunes y las generalidades de nucleación y formación de esqueletos (exoesqueletos y esqueleto interno) en protistas, invertebrados, vertebrados y plantas.

La **mineralización bacteriana** inducida por comunidades de microorganismos procariontes. Este proceso ocurre algunas veces por influencia biológica directa, pero, la mayoría de las veces, por influencia indirecta. Existen numerosos ejemplos de mineralizaciones (o formación termodinámica de minerales bajo condiciones favorables de concentración, pH y temperatura) como resultado colateral del metabolismo bacteriano (Konhauser, 2010).

Por último, las estructuras especializadas que requieren de la presencia de algunos minerales en cantidades muy pequeñas. En general se trata de estructuras o morfologías que ocurren sólo en alguna parte del ciclo vital, o bien, que están confinadas a regiones especializadas, morfológicamente.

### 12.2 Biomineralización

#### 12.2.1 El proceso de biomineralización en eucariontes

El término **biomineralización** se enfoca exclusivamente en organismos eucariontes y se refiere estrictamente a los procesos mediante los cuales el genoma de cualquier organismo ocasiona la precipitación o la formación de minerales en alguna etapa específica del ciclo vital. Es decir, como un proceso controlado biológicamente e inducido bioquímicamente donde hay vías enzimáticas

#### Sumario

##### 12.1 Introducción

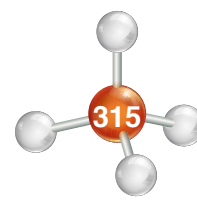
##### 12.2 Biomineralización

##### 12.3 Mineralización bacteriana

##### 12.4 Biomineralización y evolución

##### 12.5 Tendencias

##### 12.6 Conclusiones





para formar esqueletos mineralizados en los organismos eucariontes (Watabe y Kingsley, 1989). Dicho proceso requiere energía química y, por tanto, ocurre con gasto de energía metabólica del organismo (Knoll, 2003). El origen de la biomineralización incluye una historia geobiológica de interacción entre el ambiente y la biología y, por ende, en la bioquímica de los organismos a lo largo de la historia de la Tierra. Por tanto, es lógico que los esqueletos minerales que han quedado preservados en diferentes estratos de todas las edades sirvan como testigos geoquímicos y/o minerales de las condiciones paleoambientales (Hazen et al., 2015).

El Fanerozoico es el periodo geológico conocido como *vida manifiesta* que empieza con un registro macroscópico de esqueletos fósiles (Knoll et al., 2012). La biomineralización, como proceso, ha evolucionado en diferentes clados de organismos que incluyen a los animales, plantas y protistas. En la Figura 12.1, se muestra la distribución filogenética de esqueletos mineralizados de los eucariontes, mientras que en la Figura 12.2 se sintetiza la evolución de los esqueletos en el Paleozoico inferior y se muestra la diversidad mineralógica de los esqueletos y su distribución estratigráfica en el Cámbrico-Ordovícico modificado de Sepkoski (1982) en Knoll, 2003.

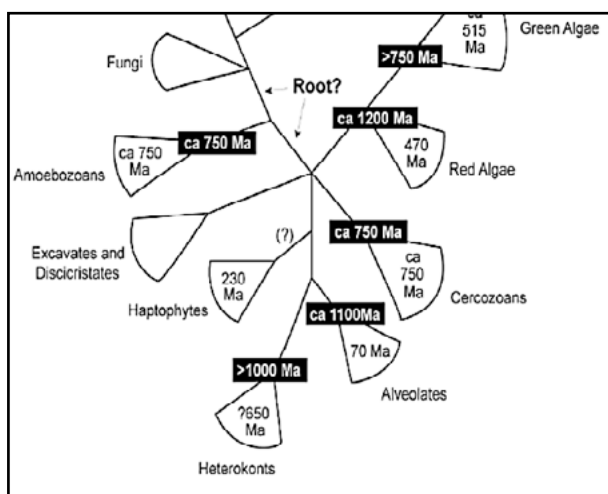


Figura 12.1. Versión simplificada de la Filogenia en el Neoproterozoico. En las cajas negras se muestra el primer registro geológico de los clados mayores. Los primeros registros de biomineralización (en las figuras claras) solo muestran aquellos que constriñen el tiempo de divergencias subsiguientes sobre una rama, tomado de Knoll 2013.

El proceso de mineralización ocurre al concentrar elementos que están disueltos en el ambiente, su posterior estabilización y almacenamiento dentro de una matriz orgánica por medio de transporte intracelular y la creación de microambientes altamente regulados para la nucleación mineral (Westbroek y Marin, 1998).

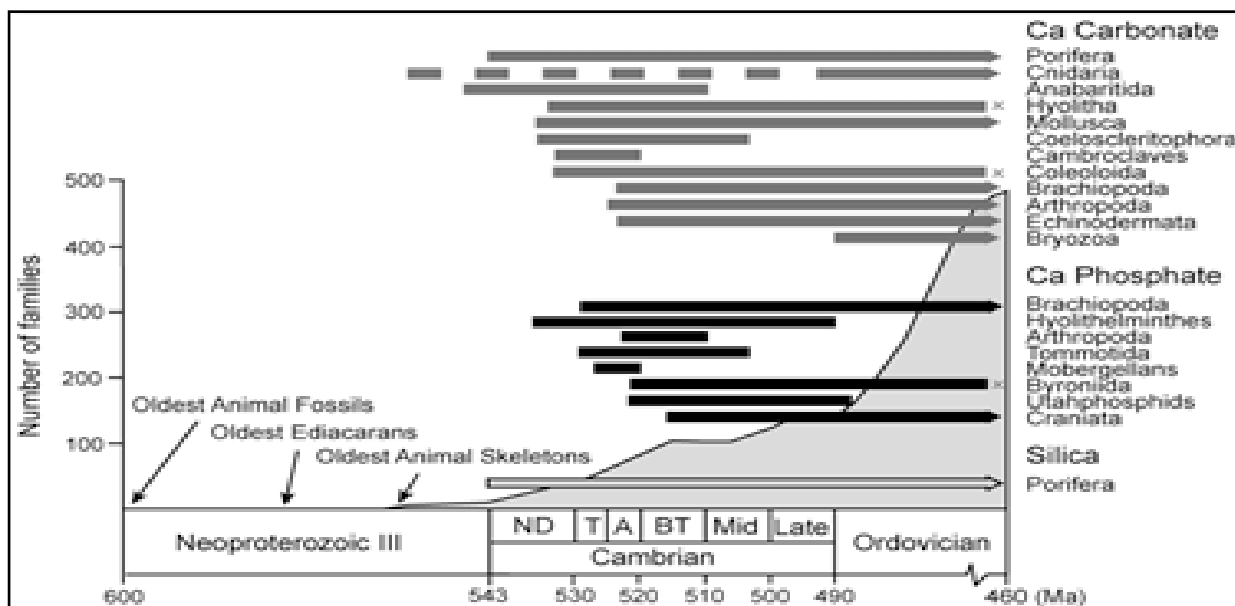


Figura 12.2. Biosfera. Se observan los minerales que han constituido exoesqueletos de los diferentes grupos animales desde el Neoproterozoico al Ordovícico.



La química de los esqueletos también se utiliza metodológicamente en Geología para inferir las condiciones ambientales del pasado por medio de la medición de diversos isótopos estables. Existen más de 60 biominerales conocidos, los más comunes son el carbonato de calcio y el sílice porque son los más abundantes esqueletos actuales y en la historia de los organismos (Dauphin, 2002). Entre los animales, la biomineralización está mucho más extendida que entre los protistas (Tabla 12.1).

Tabla 12.1. Modificada a partir de Knoll, 2003. Se resume la evolución de los primeros esqueletos en Metazoarios, mostrando la diversidad, mineralogía del esqueleto y distribución estratigráfica de los animales en el Cámbrico-Ordovícico. Animales que contienen un esqueleto interno o exoesqueleto mineral de calcita, sílice y/o fosfato de calcio. Relacionado con su tiempo de aparición.

Proterozoico	Fanerozoico 0.5 x 10 <sup>9</sup>	Grupos taxonómico
—		Procariontes
—		Protistas
	—	Algas
	—	Hongos
	—	Porifera
	—	Radiolarios
	—	Cnidaria
	—	Hidrocozoa
	—	Anabartida
	—	Tubos Calcáreos
	—	Platelmintos
	—	Anélidos
	—	Moluscos
	—	Sipuncúlidos
	—	Hiolitidos
	—	Artrópodos
	—	Briozoa
	—	Braquiópodos
	—	Cambroclaves
	—	Equinodermos
	—	Cordados

### 12.2.2 Esqueletos de calcita (aragonita, calcita magnesiana y calcita baja en magnesio)

El proceso de biomineralización no es uniforme: cada grupo tiene sus particularidades. Por ejemplo, los **moluscos** elaboran matrices orgánicas que controlan la disposición y la nucleación de carbonato de calcio y su crecimiento. Se ha demostrado que a partir de las células epiteliales del manto los moluscos secretan proteínas que controlan las fases de calcita y aragonita, produciendo las típicas estructuras lamelares, las nacaradas y las capas prismáticas. La secreción de moléculas orgánicas cargadas negativamente induce la atracción electrostática de iones de calcio al sitio de cristalización. Estas interacciones concentran los iones en sitios específicos de nucleación sobre una matriz orgánica, incrementando así un estado de supersaturación, que eventualmente, por equilibrio termodinámico, provocará la precipitación de calcita. Las macromoléculas de la matriz unen cationes divalentes de Ca a una tasa mayor, de modo que excede el número de sitios aniónicos, promoviendo un efecto aumentado de unión de calcio cuando éste interacciona con los grupos funcionales cargados negativamente que exhiben algunas proteínas. Las superficies de moléculas deben tener una densidad suficientemente alta de carga para atraer iones de la solución; la unión de calcio al grupo carboxílico es cooperativa e involucra, por lo menos, tres ligaduras y éstas son muy comunes en moluscos.

Al contrario, el caso de **equinodermos** (erizos de mar) es una excepción al modelo de calcificación ya que tienen otro proceso de mineralización. Nuevamente la participación de macromoléculas en los organismos que calcifican muestra la presencia de matrices de ácidos carboxílicos y, en menor grado, de fosfato y grupos sulfato (Weiner et al., 1983). Por lo tanto, las proteínas ricas en grupos cargados negativamente intervienen en el proceso de transporte iónico, selección de polimorfos, nucleación cristalina y crecimiento (Adadi et al., 2001). En algunos **crinoideos** la cristalografía exhibe un alto grado de uniformidad (Raup, 1962). Estudios realizados por Paul, (1979; 1988) concluyen que el filum echinodermata provee un ejemplo excepcional de estabilidad en su modo de biomineralización durante el tiempo geológico, que incluye su mineralogía y composición química.

Los **foraminíferos**, actualmente uno de los grupos de protistas bentónicos y planctónicos más diversos que habitan los mares, desarrollan testas y conchas de gran importancia micropaleontológica en la industria petrolera. Otros foraminíferos forman conchas de aragonita, o bien, de sílice opalina, usando la materia orgánica como cementante. Sus conchas también se han utilizado para cuantificar la relación de isótopos estables y/o de elementos traza e inferir la





paleoquímica de mares antiguos determinando su temperatura y salinidad (Rohling y Cook, 1999).

El proceso de mineralización, en los foraminíferos, ocurre mediante nucleación y crecimiento y uso de agua de mar capturada como materia prima para la calcificación. Esta disolución, empaquetada intracelularmente, empieza como una delgada capa que eventualmente se convierte en una cámara de foraminífero y cada cámara va creciendo encima de una superficie mineral-preexistente (Erez, 2003).

Otros organismos que incorporan calcio a su esqueleto más comunes e importantes en paleontología y en ecología, son los **corales** (Figura 12.3). Principalmente porque impactan de manera importante la química del carbono global. Aproximadamente más del 40% de carbonato ocurre en aguas tropicales. Los corales crean un área supersaturada con agua marina y bombean iones hasta subir el pH a un valor mayor de 8, en un tipo de sistema semicerrado produciendo biominerales con una concentración variable de minerales traza precipitando aragonita, seguida de una capa de aragonita fibrosa, como en el orden *Milleporina* Cuif et al., 2011.



Figura 12.3. Ejemplo de invertebrados fósiles que calcifican externamente y, por tanto, tienen un alto potencial de preservación (Colección de paleontología de la Facultad de Ciencias de la Tierra de la Universidad Nacional Autónoma de Linares (A, B, C, D, E coral rugoso; F corales coloniales; G, corte longitudinal de gasterópodo; H esponja; I, J, K; L, M y N, columna vertebral y aleta caudal de un pez).

### 12.2.3 Algas

Unas cuantas algas bentónicas han desarrollado una biomineralización calcárea. Este grupo tiene un importante papel geológico. Por ejemplo, las clorofíceas con las familias *udoteacea* y *dasycladaceae* (Figura 12.4a, b y c) fueron importantes productoras de sedimentos durante el Paleozoico Tardío, Mesozoico y Cenozoico Temprano. Después fueron substituidas por *Halimeda* de las *udoteaceas*. Este grupo producía carbonato externo y se desarrolló en aguas cálidas. Las rodofíceas, con una mayor variedad de pigmentos que las clorofíceas, tienen la capacidad de explotar casi todo el espectro de luz y están presentes en aguas marinas desde zonas someras a decenas de metros. La calcificación en este grupo es exclusivamente calcítica. Por ejemplo, en la familia *peysonellace*, la calcita tiene alto contenido de magnesio. Dependiendo de las condiciones ambientales, su calcificación es a nivel de membranas celulares con una amplia distribución desde los trópicos hasta el ártico (Coufin et al., 2011).

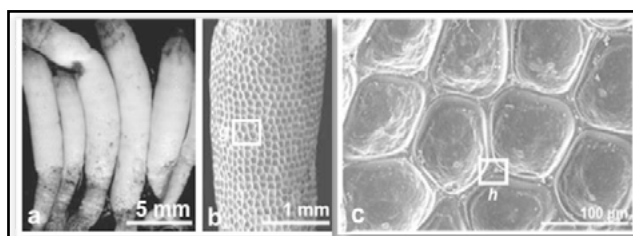


Figura 12.4. La mineralización en estas algas *dasycladaceas* es reducida a una delgada capa. En a y b se observa los tallos y c es un agrandamiento. (Tomado de Coufin et al., 2011).

### 12.2.4 Esqueletos de sílice: un ejemplo de ingeniería molecular

El sílice opalino está ampliamente distribuido en cinco o seis de los ocho clados de eucariontes (Knoll, 2003) y se distribuyen en ambientes muy concretos. La biomineralización de sílice está confinada a la célula, es decir, es una precipitación intracelular. Entre los protistas más antiguos





y abundantes se encuentran los radiolarios correspondientes a *Rhizaria*, donde el proceso de mineralización o silicificación biológica ha sido estudiado en detalle. El proceso involucra la concentración intravesicular de sílice disuelto y templados o macromoléculas orgánicas; la actividad del ion hidrógeno, así como otros parámetros son importantes (Williams et al., 2001).

En el grupo heterokontophyta, la familia bacillariophyceae, conocida como *diatomeas*, su proceso de biomineralización parece ser que no está controlado genéticamente. Su cuerpo es una célula rodeada por una pared rígida compuesta de sílice opalino (Figura 12.5). La “concha” tiene la forma de una caja de petri con dos partes llamadas frústulas que embonan perfectamente; la ornamentación y forma son importantes en su taxonomía. La precipitación de sílice requiere un transporte activo hacia los sitios locales dentro de vesículas de depósito (son modificaciones del aparato de Golgi, presente en casi todos los eucariontes) donde la precipitación de ópalo es mediada por enzimas. Durante el transporte hay macromoléculas que promueven la polimerización del ácido salicílico como las que se han identificado en esponjas: silicateína y colágeno (Krasko et al., 2000).

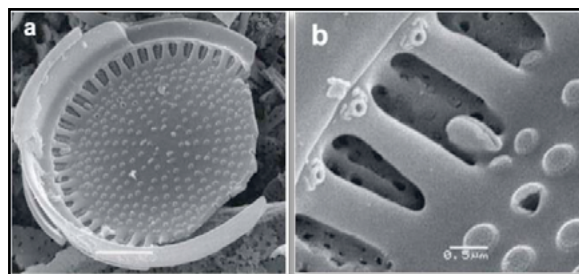
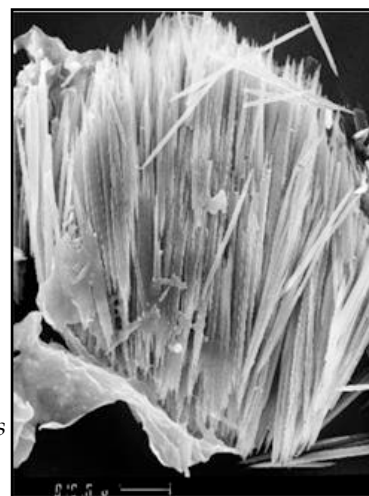


Figura 12.5. Valva fultoportulada de *Tertiarus hidalgensis* del Plioceno (Hidalgo México). Barra en “a”, 5 micras y en “b”, 2 micras; en “b” se observa fragmento de criba plana en areola marginal. (Caballero et al., 2009).

### 12.2.5 Plantas

La biomineralización ocurre en muchos órganos y tejidos de las plantas. Los biominerales comúnmente registrados son cristales de oxalato de calcio (Coté, 2009; Pérez y German, 2013) (Figura 12.6), calcita (Moore et al., 2012), y sílice amorfo (Hamm et al., 2003). Si bien en algunas especies se menciona la presencia de sulfato de calcio (Krejci et al., 2011), fosfato de calcio, oxalato de magnesio (Monje y Baran, 2005) y oxalato de estroncio (Franceschi and Schueren, 2010). Hay algunas hipótesis de la función de biomineralización en las plantas, incluyendo regulación citoplasmática de los niveles de calcio, materia prima en la liberación de polen y germinación.

Figura 12.6. Cristales de oxalato de calcio monohidratado (*whewellit*) producidos por *Psychotria*. Escala de la barra 10 micras (Weiner and Dove 2003).



### 12.3 Mineralización bacteriana

A diferencia de los eucariontes, las *bacterias*, aunque tienen una pared alrededor de la membrana celular, no forman exoesqueletos como los eucariontes. Sin embargo, sí mineralizan de manera extensa y probablemente por inducción biológica, pero de manera indirecta, es decir, no hay un programa genético que dicte la mineralización en alguna fase.

Dicha mineralización es producto de las condiciones termodinámicas principalmente pH, alcalinidad y temperatura. Entre los ejemplos más espectaculares de mineralización bacteriana destacan los *estromatolitos*, que son estructuras órgano-sedimentarias que se forman por la precipitación de carbonatos de calcio. Los estromatolitos pertenecen a un tipo especial de microbialitas. Un caso excepcional de biomineralización bacteriana es la precipitación de magnetita realizada sólo por algunas poblaciones bacterianas.



## 12.4 Biomineralización y evolución

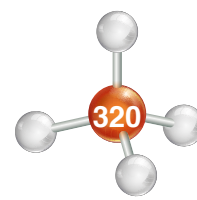
La aparición de organismos macroscópicos en el Fanerozoico hace 542 Ma del periodo Cámbrico suele considerarse el más importante para la evolución de la vida ya que la morfología de todos los grupos de animales aparece y se diversifica. En este periodo también ocurre la evolución de nuevos planes corporales y la evolución morfológica de partes duras; dicha innovación bioquímica incluye factores intrínsecos como de biología del desarrollo, pero también, ha sido considerada como una respuesta química al ambiente, al océano y a la atmósfera, así como a los cambios ecológicos (Knoll et al., 2012). La química del esqueleto que caracteriza este periodo conocido como *Explosión Cámbrica* es la evolución de biomineralización, es decir de la habilidad para generar minerales *de novo*, por síntesis enzimática; y si es enzimática, está codificada en los genes de cada organismo.

## 12.5 Tendencias

Algunas tendencias sobre el estudio de la precipitación de biominerales, incluyendo nanominerales, viene en aumento debido a la gran cantidad de estudios computacionales, experimentales y teóricos sobre las superficies minerales a escala molecular, por el cúmulo de interacciones químicas con elementos de la atmósfera, de fluidos y biológicos en las superficies minerales (Vaughan and Lloyd, 2013). La geomicrobiología estudia estas interacciones, sobre todo la interfase mineral-microbiorgánica. Las interacciones químicas de minerales y moléculas orgánicas son clave cuando se estudia la colonización de un sustrato y se favorecen reacciones de óxido-reducción. Dichas transformaciones redox también están ligadas al metabolismo.

## 12.6 Conclusiones

El potencial de fosilización de los organismos que secretan un exoesqueleto o que cuentan con un complejo sistema de osificación interno genéticamente controlado como es el caso de los vertebrados, es grande. También es cierto que la fosilización de organismos depende en gran medida de las condiciones ambientales y de eventos fortuitos a nivel fisicoquímico. La información derivada de diversos esqueletos, y de la gran cantidad de tejido suave de plantas, animales, protistas y bacterias, indican también que la química, escala temporal y espacial de la fosilización a nivel microscópico juega un papel fundamental en los procesos geológicos de corto y largo plazo que ocurren cuando muere un organismo o una población de microorganismos. Existe evidencia de que, por lo menos durante el Fanerozoico, la presión de predación ha conducido a la mineralización de esqueletos (Knoll, 2003). La formación de minerales como proceso químico determinado genéticamente también obedece a las variaciones ambientales en la concentración de cationes como Ca, Mg, y Si, entre otros, de tal modo que las mineralogías carbonatadas han oscilado durante el Fanerozoico o quizás desde mucho antes (Zhuravlev y Wood, 2008). Aunque actualmente hay mucha investigación de frontera acerca de los procesos físicos y químicos que se llevan a cabo durante las diferentes etapas de la biomineralización a través del ciclo de vida, la información es muy escasa en casi todos los grupos de organismos. Las técnicas analíticas utilizadas hoy en día en Paleontología son de gran utilidad también para modelar procesos de mineralización a nivel experimental. Especialmente los mecanismos que inducen la nucleación, el crecimiento y el remodelado o mantenimiento de estructuras minerales durante el ciclo vital de organismos o bien durante el complejo proceso de fosilización son preguntas extensas que apenas se están revisando a una escala más fina y más allá del análisis morfológico. Por consiguiente, este campo de estudio de la formación de esqueletos durante la historia de vida en la Tierra apenas va surgiendo como un área prometedora en geociencias y, especialmente, en Paleontología.





# Capítulo 13

## Modelado hidrogeoquímico para predecir procesos de mezcla en acuíferos

José Antonio Hernández Espriú, Berenice Zapata Norberto,  
Luis Velázquez Aguirre, Sergio Macías Medrano, Alonso Soberón Sainz Trápaga

### 13.1 Introducción

La *recarga gestionada de acuíferos* (MAR, por sus siglas en inglés, Managed Aquifer Recharge) es una alternativa probada y costo-efectiva que permite aumentar las reservas de agua subterránea. Además, tiende a equilibrar la oferta-demanda en sistemas urbanos de abastecimiento y proporciona protección a acuíferos en estrés hídrico (Ward y Dillon, 2012), especialmente en países áridos y semiáridos.

El concepto MAR se refiere a la recarga intencionada de acuíferos para aumentar la disponibilidad en términos volumétricos. Involucra una gran variedad de métodos para recargar y recuperar el vital líquido. Dillon (2005) proporciona una clasificación estandarizada mediante 11 técnicas para inyectar/recuperar agua usando pozos, lagunas de infiltración, tanques de percolación y cosecha de agua de lluvia. La más popular consiste en inyectar agua a través de un pozo, almacenarla en el acuífero y recuperarla por bombeo, tiempo después, usando el mismo pozo (ASR, Acuífer Storage and Recovery). Una variante del ASR, implica inyectar y recuperar el agua almacenada usando diferentes pozos (ASTR, Acuífer Storage Transfer and Recovery) (Dillon, 2002).

La ingeniería del MAR ha sido implementada con éxito en Estados Unidos, Dinamarca, Austria, Holanda, España, Israel y Australia. Los dos últimos países poseen gran experiencia en la práctica, desde 1960-1970 (ver, p.e., Idelovitch et al. (2003); SKM y CSIRO (2012)). En México, aunque ha habido avances en temas regulatorios (CONAGUA, 2003, 2007) y se ha estudiado que la recarga gestionada puede ser una acción clave para incentivar el manejo integral del agua (Palma et al. 2014), los proyectos MAR a gran escala son prácticamente inexistentes.

La factibilidad de proyectos MAR involucra el análisis de múltiples factores antes de su implementación. Debe ser evaluado el volumen y tipo de agua fuente, la hidrogeología del acuífero a recargar, los trenes de tratamiento previos a la infiltración y las alteraciones que podría sufrir la calidad del agua nativa del acuífero, al mezclarse con una fuente ajena al medio. Para resolver el último aspecto, deben utilizarse herramientas hidrogeoquímicas que permitan evaluar y predecir reacciones entre el agua fuente y el agua subterránea de fondo.

La *hidrogeoquímica*, encargada de estudiar los procesos geoquímicos en acuíferos es una de las ramas de la hidrogeología que mayor crecimiento científico ha mostrado, al menos durante las dos últimas décadas. Mediante la hidrogeoquímica es posible estudiar los procesos de interacción

#### Sumario

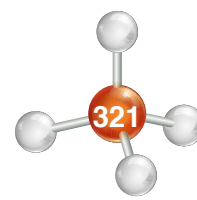
##### 13.1 Introducción

##### 13.2 Métodos

##### 13.3 Modelado hidrogeoquímico

##### 13.4 Resultados y discusión

##### 13.5 Conclusiones





agua-roca y evaluar reacciones entre el agua subterránea nativa y agentes externos (Warner et al. 2008; Zhao et al. 2010; Sanford 2011; Hernández-Espriú et al. 2013; Yang et al. 2014; Rafighdoust et al. 2015; Carol et al. 2015; Pi et al. 2015; Alçiçek et al. 2016; Redwan and Abdel Moneim 2016), entre otras aplicaciones.

La *modelación hidrogeoquímica* permite evaluar procesos de mezcla, especiación química, índices de saturación, sorción y transporte reactivo entre diferentes componentes. Por esta razón, el modelado hidrogeoquímico es una herramienta ideal para estudiar la factibilidad de un proyecto MAR, desde el punto de vista de las reacciones y procesos que podrían esperarse entre el agua subterránea nativa (natural) y el agua fuente (ajena al medio) que se usará para recargar. De hecho, este punto es mandatorio para cualquier proyecto MAR en México, de acuerdo con lo estipulado en la Norma Oficial Mexicana NOM-014-CONAGUA-2003 (CONAGUA, 2003).

PHREEQC (Parkhurst y Appelo, 1999; 2013) es un modelo ampliamente utilizado para analizar procesos geoquímicos acuosos. Representa una poderosa herramienta computacional en C y C++ para desarrollar aplicaciones hidrogeoquímicas de especiación, reacciones de columna, transporte 1D y modelado geoquímico inverso, usando programación en bloques a través de líneas de comando. PHREEQC, es un programa abierto que actualmente constituye el estándar internacional en cómputo científico hidrogeoquímico (Halim et al. 2005; Lecomte et al. 2005; Tiruta-Barna 2008).

El objetivo de esta investigación está centrado en establecer la compatibilidad hidrogeoquímica entre el agua subterránea nativa y el agua de salida de una planta de tratamiento terciario (PTAR), que se usará para recargar un sector del acuífero en la porción sur de la Cuenca de México. Para ello se desarrolló un modelo hidrogeoquímico en PHREEQC que permitió predecir las reacciones y procesos de mezcla entre la composición de fondo del acuífero y el agua de salida de la PTAR, que recargará el acuífero a través de un sistema ASTR y supondrá el primer proyecto MAR en México.

## 13.2 Métodos

### 13.2.1 Área de estudio

El área de estudio se localiza en la porción suroeste de la Cuenca de México, que representa el límite de la parte sur de la Mesa Central y el sector oriental de la Faja Volcánica Transmexicana.

El modelo conceptual del área ha sido postulado en trabajos previos (Pérez-Cruz 1988; Vázquez-Sánchez and Jaimes- Palomera 1989; Santoyo et al. 2005; Hernández-Espriú et al. 2014). Se trata de un acuífero semiconfinado compuesto por rocas volcánicas, depósitos aluviales, volcanoclásticos y piroclásticos basálticos y andesíticos del Plio-Cuaternario. Le sobreyace un acuitardo de 20-40 m de espesor en la zona de estudio, compuesto por arcillas plásticas sobresaturadas, limos y arenas finas.

A nivel local, el área evaluada para la implementación del proyecto MAR (Figura 13.1), consta de una zona predominantemente cubierta por bosque en el que se ubican tres lagos. Tentativamente, la recarga se llevará de manera directa en la zona saturada, a través de un

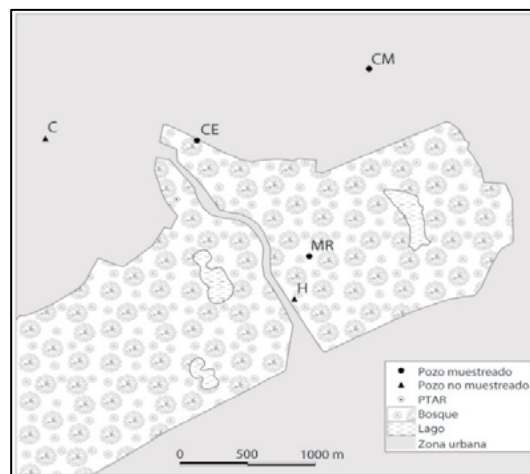


Figura 13.1. Localización de la zona estudio. PTAR: Planta de tratamiento de aguas residuales





pozo de inyección de 200 m de profundidad (no se tiene la ubicación precisa) a un gasto estimado de 20-40 l/s. El agua fuente provendrá de la salida de una planta de aguas residuales sometida a un tren terciario de tratamiento (PTAR). En la Figura 13.1 se muestra la ubicación de la PTAR y de cinco pozos de abastecimiento para consumo humano, que dotan de agua a la zona urbana que circunda el bosque.

### 13.2.2 Caracterización hidrogeoquímica

Fue realizada una caracterización hidrogeoquímica inicial con objeto de establecer la composición de fondo del acuífero. Los investigadores tomaron muestras de agua en los pozos CE, MR, CM y de la salida de la PTAR (Figura 13.1). Las muestras fueron evaluadas en un laboratorio analítico comercial, en el que se valoraron los siguientes iones mayoritarios y componentes físicos: conductividad eléctrica, pH, alcalinidad total (TAC), dureza, sólidos totales disueltos (TDS),  $\text{HCO}_3^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$  y  $\text{Mg}^{2+}$ .

La confiabilidad de los datos, fue analizada estimando el error analítico por medio de un balance eléctrico entre aniones y cationes (Merkel y Planer-Friedrich, 2008):

$$E = \frac{\sum_{i=1}^n \text{Cationes} - |\sum_{i=1}^n \text{Aniones}|}{\sum_{i=1}^n \text{Cationes} + |\sum_{i=1}^n \text{Aniones}|} \cdot 200 \dots \text{Ec. 13.1}$$

donde E (%) es el error del análisis. Seguimos la recomendación de Martínez-Alfaro et al (2006), quienes establecieron un error máximo permitido del 5%. La composición química de las muestras se expresó gráficamente usando el diagrama ternario de Piper (1953) y los polígonos de Stiff (1951) para establecer variaciones composicionales y facies hidroquímicas. Para ello, las concentraciones de los iones mayoritarios se transformaron de mg/l a miliequivalentes/l [meq/l].

## 13.3 Modelado hidrogeoquímico

### 13.3.1 Simulación de mezclas

Para el desarrollo del modelo hidrogeoquímico fue empleada la herramienta computacional PHREEQC vr. 3 (Parkhurst y Appelo, 1999; 2013) compilado por el US Geological Survey. PHREEQC, programa de cómputo escrito en C y C++ para desarrollar aplicaciones hidrogeoquímicas de especiación, reacciones de columna, transporte 1D y modelado geoquímico inverso, usando programación en bloques a través de líneas de comando.

En PHREEQC fue estructurado un código donde se simuló numéricamente las mezclas a diferentes proporciones con objeto de: (1) estimar la composición de fondo del acuífero mezclando la hidrogeoquímica composicional de los pozos CE, MR y CM, y (2) simular mezclas entre la composición de fondo del acuífero (CE + MR + CM) y el agua tratada.

Debido a que PHREEQC permite realizar simulación de mezclas por pares, fueron examinadas diferentes proporciones de una muestra con respecto a otra. Por ejemplo, la mezcla M1 corresponde a la mezcla de las muestras de los pozos CE y MR a razón de 50%-50%, de manera que  $M1 = 0.5CE + 0.5MR$ . Bajo esta consideración, la simulación de mezclas fue analizada con base en el siguiente esquema:

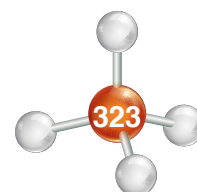
$$M1 = 0.5CE + 0.5MR \dots \text{Ec. 13.2}$$

$$M2 = 0.5M1 + 0.5CM = \text{Acuífero} \dots \text{Ec. 13.3}$$

$$M3 = 0.9 \text{ Acuífero} + 0.1PTAR \dots \text{Ec. 13.4}$$

$$M4 = 0.7 \text{ Acuífero} + 0.3PTAR \dots \text{Ec. 13.5}$$

$$M5 = 0.5 \text{ Acuífero} + 0.5PTAR \dots \text{Ec. 13.6}$$







$M6 = 0.3 \text{ Acuífero} + 0.7 \text{ PTAR}$  ..... Ec. 13.7

$M7 = 0.1 \text{ Acuífero} + 0.9 \text{ PTAR}$  ..... Ec. 13.8

La mezcla simulada con la ecuación (13.3) representa la composición de fondo del acuífero, obtenida de la mezcla de la composición de las tres muestras (CE, MR y CM). Por otro lado, resulta muy difícil determinar la proporción real de mezcla que se dará entre el agua de salida de la PTAR y el agua nativa del acuífero, una vez que se implemente el proyecto MAR. El esquema anterior (ecs. 13.2-13.8) permitió evaluar escenarios diversos, que consideran la influencia dominante de la PTAR sobre el acuífero nativo y viceversa, así como mezclas intermedias.

### 13.3.2 Simulación de índices de saturación

Fueron simulados *índices de saturación* (SI), con objeto de estudiar las fases minerales del acuífero que tenderán a precipitarse o disolverse, como producto de las posibles reacciones geoquímicas entre el agua de salida de la PTAR y el agua subterránea nativa. Para ello, se estructuró un segundo código en PHREEQC que permitió simular la reacción producida al añadir 10 moles de los minerales que comúnmente forman incrustaciones, en 1 litro de las mezclas especificadas en las ecuaciones 13.4-13.8. Está reportado que si el  $SI < 0$ , la mezcla tenderá a disolver el mineral. Si el  $SI > 0$ , la mezcla tenderá a precipitar esa fase sólida. Índices cercanos a cero sugieren condiciones de equilibrio termodinámico entre la mezcla y el mineral (Martínez-Alfaro, et al. 2006).

Fueron analizados los SI esperados entre las mezclas simuladas en las ecuaciones 13.4-13.8 y las siguientes fases minerales: anhidrita, barita, calcita, celestita, dolomita, goethita, yeso, halita, hematita, magnesita, periclusa, pirolusita, cuarzo y siderita.

Las simulaciones hidrogeoquímicas en PHREEQC se basan en un esquema estacionario (estático) que no considera otras fuentes de recarga natural (p.e., precipitación), artificial, o modificaciones al gradiente hidráulico por flujo convergente. Las mezclas simuladas reaccionan instantáneamente en condiciones de temperatura de 25 °C y 1 atmósfera de presión (Parkhurst y Appelo, 1999).

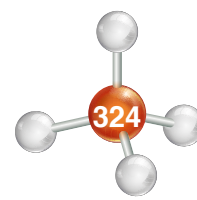
## 13.4 Resultados y discusión

### 13.4.1 Caracterización hidrogeoquímica y simulación de mezclas

La variación composicional de las muestras CE, MR, CM, PTAR y de las mezclas simuladas denominadas Acuífero, M3, M4, M5, M6, M7 y M8, aparecen en las Figuras 13.2 y 13.3. Los errores del análisis en laboratorio son de 0.53, 3.05, 1.10 y 1.35%, para las muestras PTAR, CE, CM y MR, respectivamente. Por tanto, los resultados se consideran confiables.

De acuerdo con los polígonos de Stiff (1951) (Figura 13.2), los pozos CM y MR muestran composiciones magnésicas -bicarbonatadas, mientras que el pozo CE exhibe una tendencia sódica -bicarbonatada. En este sentido, la simulación de la mezcla de la ecuación (13.3) demuestra que la composición de fondo del acuífero tiene una firma hidrogeoquímica magnésica-bicarbonatada, consistente con trabajos previos en la zona de estudio (Huizar-Alvarez et al. 2004). Es claro que el agua tratada está muy poco mineralizada (Figura 13.2) y exhibe una tendencia sódica-clorurada. Por ende, el agua fuente difiere de la hidrogeoquímica natural del acuífero, en composición y concentración.

De acuerdo con el modelo de simulación, la composición de mayor compatibilidad se podría esperar si la mezcla entre la composición natural del acuífero y el agua de la salida de la PTAR se da en una proporción de nueve partes del acuífero por una parte de la PTAR (M3), es decir, 90%-





10%. A medida que la influencia de la PTAR sea mayor, el agua de mezcla tenderá a perder contenido iónico.

Tal es el caso de las mezclas simuladas M4 (70%-30%), M5 (50%-50%), M6 (30%-70%) y M7 (10%-90%). En particular, es factible apreciar que la mezcla M7 simulada a una proporción 10%-90% es muy similar en composición y grado de mineralización al agua de salida de la PTAR. Esta mezcla representa el mayor grado de incompatibilidad geoquímica entre el agua subterránea nativa y el agua fuente, en caso de que se alcance esta proporción. Resultados similares se muestran en el diagrama ternario de Piper (1953) (Figura 13.3).

Para comprobar la disminución del contenido iónico a medida que la influencia de la PTAR es mayor en la mezcla, se analizaron las concentraciones iónicas de cada componente y se compararon con la concentración de fondo de ese mismo ion. Como se observa en la gráfica de barras de la Figura 13.4, las máximas concentraciones de los iones mayoritarios ( $\text{HCO}_3^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$  y  $\text{Mg}^{2+}$ ) se detectan, en todos los casos, en la mezcla que representa la composición de fondo del acuífero.

Por ejemplo, el ion bicarbonato ( $\text{HCO}_3^-$ ) exhibe una concentración de fondo de ~200 mg/l. No obstante, a medida que la influencia de la composición nativa disminuye a razón de 90%-10%, 70%-30%, 50%-50%, 30%-70% y 10%-90%, la concentración en la mezcla final simulada se reduce a ~180, 140, 100, 60 y 20 mg/l, respectivamente. Este comportamiento es replicable en todos los iones restantes. Se concluye que la influencia del agua de salida de la PTAR disminuye la mineralización de la mezcla final, por procesos de dilución y dispersión, al menos Fickiana.

En hidrogeoquímica, las concentraciones bajas se asocian con una buena calidad del agua (Martínez-Alfaro, et al. 2006; Merkel y Planer-Friedrich, 2008), excepto en aquellos casos donde

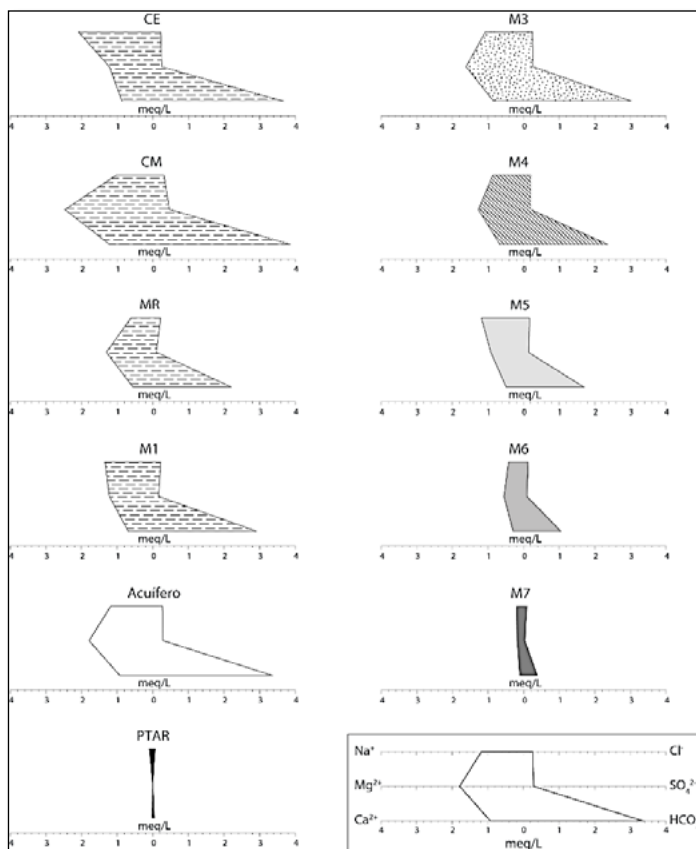


Figura 13.2. Polígonos de Stiff de los pozos muestreados y mezclas simuladas. Escala en meq/l.

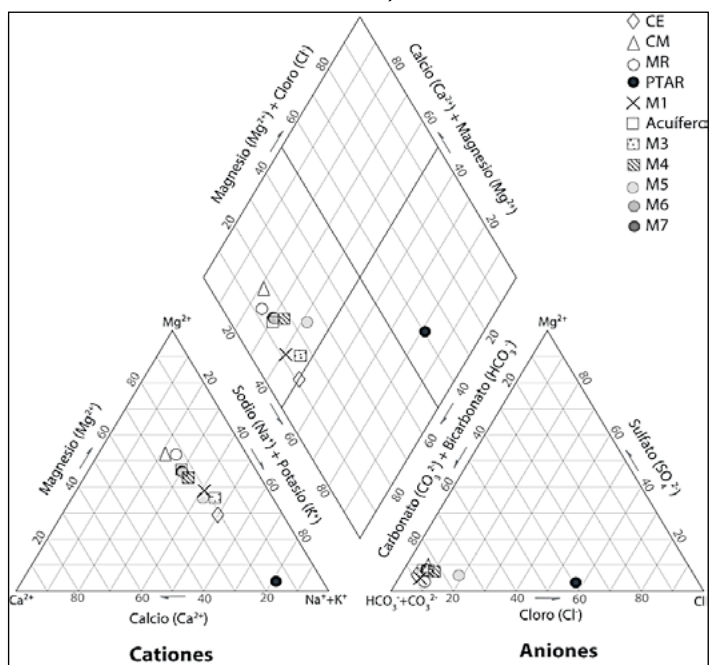


Figura 13.3. Diagrama ternario de Piper de los pozos muestreados y mezclas simuladas.



las aguas mineralizadas representan el objeto de un estudio o proyecto en particular (Ünsal and Afşin 1999; Maréchal et al. 2014). Bajo esta consideración, podría sugerirse que la influencia del agua de salida de la PTAR está sobretratada y su bajo contenido mineralizante genera procesos de dilución, mejorando la calidad química del acuífero. Sin embargo, la simulación realizada se basa en un esquema estacionario. Esta consideración podría modificarse una vez que el proyecto MAR entre en funcionamiento.

En la investigación de Xanke et al. (2015) se reporta que el agua subterránea del acuífero Wala (Jordán) ha mostrado fluctuaciones en la salinidad debida a cambios temporales en la concentración del ion cloruro, durante 10 años de operación de un sistema MAR, basado en la inyección de aguas pluviales y residuales tratadas, a través de lagunas de infiltración y pozos ASR. Observaciones similares se han reportado en Goode et al. (2013) y Schmidt et al. (2013) en sistemas acuíferos aledaños. En estos trabajos se establece que los cambios en la salinidad responden a variaciones de la recarga natural, tasas de extracción, heterogeneidades hidráulicas y fluctuaciones del gradiente. Se concluye, entonces, que los resultados de la simulación deben tomarse con cuidado, ya que solo proporcionan una idea aproximada de los procesos de mezcla que se podrían dar a escala de campo, una vez que el proyecto MAR se implemente en la zona de estudio.

Por otro lado, como se desconoce la proporción real de mezcla que se dará entre el agua fuente y nativa en el subsuelo, se analizó estadísticamente la variación composicional de todas las mezclas posibles (Figura 13.5). Los resultados se expresan en términos de un diagrama de cajas (boxplot) que relaciona los valores mínimo, máximo, primer y tercer cuartil ( $Q_1$  y  $Q_3$ , respectivamente) y la mediana de la distribución de las concentraciones de cada ion, considerando todas las proporciones simuladas. El espacio intercuartil ( $Q_3 - Q_1$ ) se considera el intervalo más representativo de la distribución estadística (Holzbecher, 2008).

De acuerdo con las mezclas simuladas, el intervalo de las concentraciones esperadas ( $Q_3 - Q_1$ ) de calcio, cloruro, potasio, magnesio, sodio, nitrato y sulfato, será de 6-18, 5-8, 2-4, 5-20, 10-25, 17-35 y de 3-7 mg/l, respectivamente. La mediana se estima en el orden de ~12, 6, 3, 13, 16, 24 y 8 mg/l, respectivamente. El valor máximo y el espacio intercuartil de cada ion, se encuentra por debajo de los límites máximos permisibles estipulados en la NOM-127-SSA-1994 (Secretaría de Salud, 1994). Esto sugiere que la mezcla

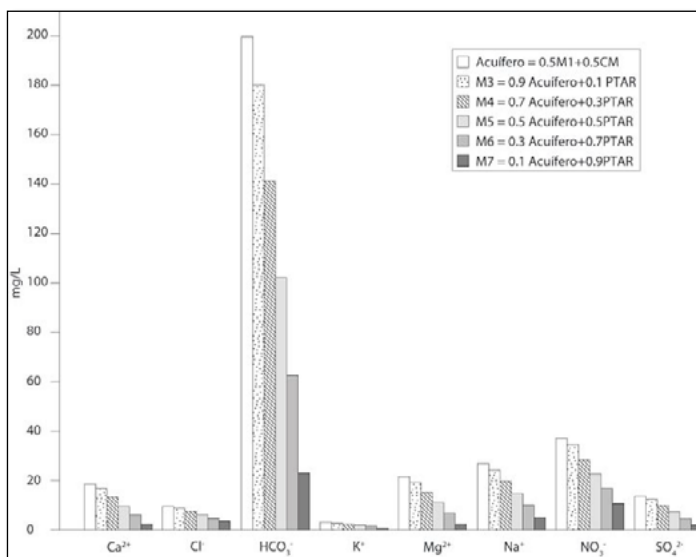


Figura 13.4. Concentraciones esperadas para las mezclas simuladas.

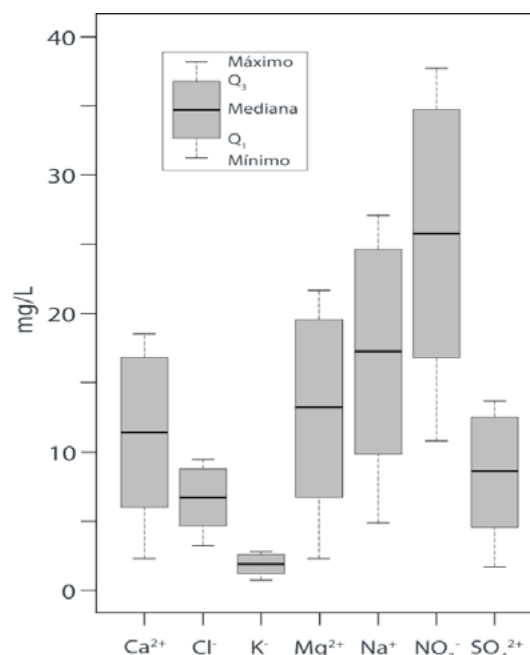


Figura 13.5. Diagrama boxplot de las concentraciones para las mezclas simuladas.  $Q_1$ : primer cuartil;  $Q_3$ : tercer cuartil.



esperada entre el agua fuente y el agua subterránea nativa seguirá siendo apta para consumo humano, considerando las proporciones analizadas.

### 13.4.2 Índices de saturación simulados

Los índices de saturación se analizaron simulando una reacción entre 10 moles de minerales (sulfatos, carbonatos, evaporitas y óxidos) y 1 litro de las mezclas. PHREEQC calcula un cambio o diferencial ( $\delta$ -mol) entre las 10 moles de entrada y los moles finales producidos durante la reacción. Si  $\delta$ -mol es positivo, la mezcla tenderá a precipitar ese mineral y viceversa.

Los resultados (Figura 13.6) muestran que los minerales con tendencia a precipitar serán la anhidrita ( $\text{CaSO}_4$ ), dolomita ( $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$ ), hematita ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ) y pirolusita ( $\text{MnO}_2$ ). Por otro lado, las mezclas tenderán a disolver calcita ( $\text{CaCO}_3$ ), goethita ( $\text{FeO}(\text{OH})$ ), yeso ( $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ), halita ( $\text{NaCl}$ ), magnesita ( $\text{MgCO}_3$ ), periclusa ( $\text{MgO}$ ) y siderita ( $\text{FeCO}_3$ ).

El agua nativa del acuífero y las mezclas simuladas tienden a disolver carbonatos y óxidos, exceptuando la hematita y pirolusita. Esto sugiere que tanto el agua de mezcla como la composición de fondo tienden a la corrosividad.

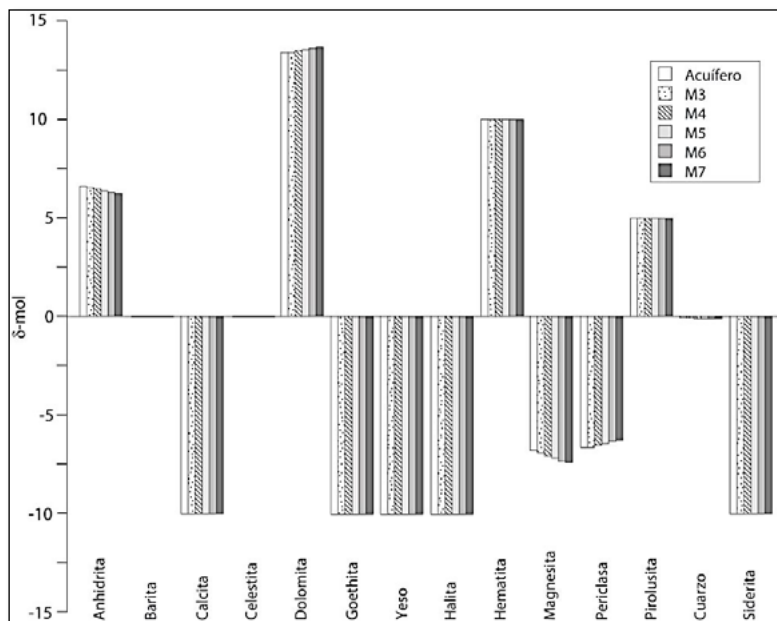


Figura 13.6. Resultados de la simulación de los índices de saturación para las mezclas analizadas.

Para comprobar este argumento, calculamos el índice de saturación de Langelier (LSI) de acuerdo con lo estipulado en Merkel y Planer-Friedrich (2008), para determinar si el agua está sobresaturada o subsaturada con respecto a la calcita. Se estimó que el agua subterránea natural tiene un LSI de -0.7. Además, este índice disminuye a medida que la relación del agua fuente en la mezcla aumenta. Por ejemplo, para proporciones acuífero-agua fuente de 90-10, 70-30, 50-50, 30-70 y 10-90, el LSI es de -0.8, -1.0, -1.3, -1.8 y -2.9, respectivamente.

De acuerdo con los criterios reportados en Carrier (1965) y Rafferty (1999), los índices calculados corresponden a aguas corrosivas. Esto indica, que el agua subterránea es naturalmente corrosiva en la zona de estudio y la adición del agua fuente no modifica esta condición. Además, el agua de fondo y las mezclas finales tenderán a disolver primordialmente calcita (como se había determinado previamente; ver Figura 13.5), lo que podría generar incrustaciones de este mineral en el ademe del pozo de inyección.

Investigaciones recientes relacionadas con la hidrogeoquímica de sistemas MAR (Vanderzalm et al. 2010; Antoniou et al. 2012) sugieren que la disolución de la calcita, bajo ciertos escenarios hidrogeológicos, representa el cambio inorgánico más dominante, independientemente de la estrategia de operación del sistema (ASR vs. ASTR). Nuestros resultados advierten que podrían esperarse problemas relacionados con la incrustación de calcita en la tubería ranurada. Además,





se prevé corrosión a mediano plazo del ademe del pozo de inyección, durante la operación del sistema MAR.

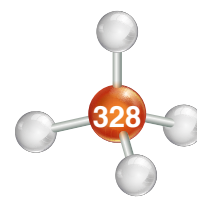
### 13.5 Conclusiones

En esta investigación, se realizó un modelado hidrogeoquímico para predecir procesos de mezcla, como parte de la factibilidad de un proyecto MAR, que pretende aumentar intencionalmente la disponibilidad de un sector del acuífero en la porción sur de la Cuenca de México.

Los resultados indican que la firma hidrogeoquímica natural del acuífero ( $\text{HCO}_3^- - \text{Mg}^{2+}$ ) no se modifica cuando se mezcla con el agua de salida de una planta terciaria, en ninguna de las proporciones simuladas. De hecho, la influencia del agua fuente genera dilución en el agua subterránea nativa, disminuyendo las concentraciones de los iones mayoritarios, al menos en condiciones estáticas. Esto indica que el agua seguirá siendo apta para consumo humano.

El agua subterránea en la zona de estudio es naturalmente corrosiva y se espera que las mezclas con el agua fuente también lo sean. Durante la operación del sistema MAR se anticipan incrustaciones de calcita en la tubería ranurada y corrosión del ademe. Estos aspectos pueden minimizarse, por un lado, si se coloca un ademe de PVC en lugar de acero. Por otro, se advierte la necesidad de diseñar un programa de mantenimiento preventivo del pozo de inyección, que incluya el monitoreo continuo de la calidad del agua, la vigilancia de la tubería ranurada usando videos de pozo y la evaluación de las pérdidas de carga, por medio del análisis anual de una prueba hidráulica a gasto escalonado.

Se concluye que la modelación hidrogeoquímica representa una herramienta útil, relativamente sencilla y de fácil acceso, que permite evaluar, bajo la consideración de escenarios diversos, los procesos hidrogeoquímicos más relevantes que podrán esperarse en proyectos de recarga gestionada de acuíferos.







# Capítulo 14

## Geoquímica en el drenaje ácido de mina: aplicación en un sistema de tratamiento con rocas calcáreas

José Enrique Santos Jallath, Francisco Martín Romero, José Luz González Chávez y Alejandrina Castro Rodríguez.

### 14.1 Introducción

El *drenaje ácido de mina* (DAM) es, quizá, el problema ambiental más serio al que se enfrenta la industria minera, ya que la acidez del agua y la elevada concentración de metales en disolución puede causar la afectación de cuerpos superficiales de agua, acuíferos y suelos, o bien, daño directo en seres vivos (Sengupta, 1993; Younger *et al.*, 2002; Lottermoser, 2007; Wolkersdorfer, 2008; Spitz y Trudinger, 2009). Su generación se debe a un fenómeno natural que se presenta en las minas o en los depósitos de residuos mineros, como jales o terreros, cuando se produce la oxidación de los sulfuros minerales. En presencia de agua y oxígeno, se llevan a cabo reacciones de óxido-reducción en las que se oxida el azufre de los minerales para formar sulfatos ( $\text{SO}_4^{2-}$ ) y liberar protones ( $\text{H}^+$ ) que provocan acidez en el agua (Blowes *et al.*, 2004). El DAM se caracteriza por tener  $\text{pH} < 5$ , su alto contenido de sólidos suspendidos, su coloración amarillo ocre, así como por presentar en disolución metales pesados, metaloides y sulfatos. El riesgo que representa para el ambiente radica en que su proceso de generación puede durar cientos de años (Younger *et al.*, 2002; Lottermoser, 2007) y resulta complicado su control una vez que se concluyen las operaciones en las minas.

Una de las formas de controlar el drenaje ácido consiste en la aplicación de los llamados *sistemas de tratamiento pasivos*, en los cuales se utilizan materiales naturales como rocas carbonatadas, plantas de diferentes géneros, materia orgánica y/o microorganismos (López *et al.*, 2002; Filipek *et al.*, 2003; Johnson y Hallberg, 2005). En este tipo de sistemas ocurren procesos físicos, químicos y biológicos que permiten neutralizar el agua y remover los metales y metaloides contenidos en disolución.

Entre los tratamientos pasivos que más se han aplicado están aquellos que utilizan rocas con minerales carbonatados que de manera natural consumen la acidez del agua. Por ejemplo, calcita ( $\text{CaCO}_3$ ), dolomita ( $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$ ), anquerita ( $\text{Ca}(\text{Fe},\text{Mg})(\text{CO}_3)_2$ ) o magnesita ( $\text{MgCO}_3$ ) (Blowes *et al.*, 2004; Lottermoser, 2007). La roca caliza, por su alto contenido de calcita y su abundancia en algunos ambientes geológicos, ha sido ampliamente utilizada. La disolución de la calcita produce

### Sumario

#### 14.1 Introducción

#### 14.2 Generación y neutralización del DAM

#### 14.3 Tratamiento del drenaje ácido

#### 14.4 Procesos geoquímicos en la remoción de los elementos traza

#### 14.5 Caso de aplicación

#### 14.6 Resultados y discusión

#### 14.7 Conclusiones



iones bicarbonato ( $\text{HCO}_3^-$ ) o ácido carbónico ( $\text{H}_2\text{CO}_3$ ), según las condiciones del medio, ligeramente ácidas a alcalinas o fuertemente ácidas. Esta disolución depende, en gran medida, de la presencia o ausencia de dióxido de carbono (Younger *et al.*, 2002). En sistemas abiertos donde la calcita está en contacto con el  $\text{CO}_2$  de la atmósfera, la disolución de la calcita se incrementa, hay mayor producción de bicarbonatos y, por tanto, mayor consumo de iones hidrógeno presentes en el DAM.

La movilidad de los metales en disolución presentes en el DAM, está regida principalmente por el pH y las condiciones oxidantes o reductoras del medio (Reddi e Inyang, 2000; Younger *et al.*, 2002). Las variaciones de pH determinan si un elemento puede estar en disolución (forma acuosa) o bien precipitar en forma de hidróxido, de carbonato, de sulfuro o no precipitar y quedar retenido por algún fenómeno de sorción sobre la superficie de un mineral secundario formado en el proceso de oxidación (Langmuir, 1997; Lottermoser, 2007).

La generación del drenaje ácido, así como su tratamiento con rocas carbonatadas y la remoción de los metales contenidos en disolución, se relacionan con procesos geoquímicos que dependen de las características propias de los minerales, así como de las condiciones que se tienen en el ambiente.

En este capítulo se abordan los aspectos teóricos más relevantes de la geoquímica que ocurre en la generación del DAM y en su tratamiento con rocas carbonatadas, para luego presentar la aplicación de un sistema de tratamiento que se ha desarrollado para controlar el drenaje ácido en una mina de México.

## 14.2 Generación y neutralización del DAM

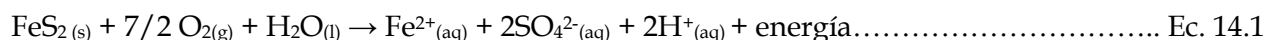
### 14.2.1 Características del drenaje ácido

En las minas donde hay presencia de minerales con sulfuros metálicos, es posible que se genere DAM debido a la oxidación de estos compuestos en las obras mineras o en los depósitos de residuos. Los minerales que más favorecen la generación de DAM, por su reactividad, son los sulfuros de hierro, piritita ( $\text{FeS}_2$ ), marcasita ( $\text{FeS}_2$ ) y pirrotita ( $\text{Fe}_{1-x}\text{S}$ ); sin embargo, otros minerales son menos reactivos, pero también sufren un proceso de oxidación, tal es el caso de la calcopirita ( $\text{CuFeS}_2$ ), bornita ( $\text{Cu}_3\text{FeS}_4$ ), arsenopirita ( $\text{FeAsS}$ ) y esfalerita rica en hierro ( $(\text{Zn}, \text{Fe})\text{S}$ ) (Blowes *et al.*, 2004; Lottermoser, 2007).

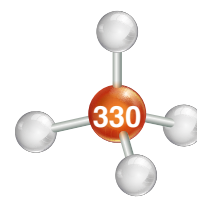
El DAM se caracteriza por su acidez ( $\text{pH} < 5$ ), su alto contenido de sólidos suspendidos, así como por presentar en disolución sales ( $\text{CE} > 6 \text{ mS/cm}$ ), metales pesados ( $> 10 \text{ mg/L}$ ), metaloides ( $> 5 \text{ mg/L}$ ) y sulfatos ( $> 1,000 \text{ mg/L}$ ); así como por la presencia de microorganismos. La coloración rojocre es característica del DAM y se debe a los precipitados de hierro en forma de oxihidróxidos.

### 14.2.2 Proceso de generación

La piritita es el mineral más ampliamente estudiado dada su abundancia en los depósitos de mineral (como mineral asociado) y por su alta reactividad a la oxidación (Sengupta, 1993; Blowes *et al.*, 2004; Lottermoser, 2007); de hecho, se considera el principal generador de DAM. La oxidación de la piritita ocurre cuando la superficie del mineral queda expuesta al oxígeno y al agua. En una primera etapa predominan las reacciones de oxidación química:

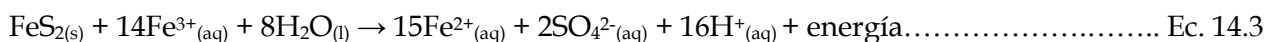


La reacción produce  $\text{Fe}^{2+}$  en disolución, sulfatos que aumentan los sólidos disueltos totales e iones hidrógeno que acidifican el agua (Ec. 14.1). El ion ferroso, a su vez, se oxida a ion férrico ( $\text{Fe}^{3+}$ )





(Ec. 14.2), el cual también actúa como agente para oxidar la piritita y producir más ion ferroso, sulfatos e iones hidrógeno (Ec. 14.3).



La abundancia del  $\text{Fe}^{3+}$  es dependiente del pH de la disolución, su solubilidad es muy baja a valores neutros y alcalinos de pH por lo que su presencia predomina a pH ácido. La concentración de  $\text{Fe}^{3+}$  disuelto en agua ácida disminuye conforme aumenta el pH y su solubilidad está controlada por la precipitación de hidróxidos férricos ( $\text{Fe}(\text{OH})_3$ ) (Ec. 14.4) y oxihidróxidos ( $\text{FeOOH}$ ) (Ec. 14.5) (Lottermoser, 2007).



La precipitación de los hidróxidos y oxihidróxidos es una reacción de hidrólisis que también libera iones hidrógeno, lo que ocasiona la caída del pH.

En los ambientes donde se genera el DAM, generalmente hay abundante presencia de microorganismos (bacterias, arqueas, hongos, algas, levaduras y protozoarios) que son tolerantes a las condiciones extremas y capaces de utilizar compuestos inorgánicos reducidos (de azufre y hierro) como fuente de energía en el metabolismo respiratorio. Principalmente los géneros *Acidithiobacillus*, *Thiobacillus* y *Leptospirillum* contienen numerosas especies que pueden utilizar como fuente de energía diversos compuestos de azufre (Blowes *et al.*, 2004). Por ejemplo, las especies *Acidithiobacillus ferrooxidans* y *Leptospirillum ferrooxidans* oxidan los compuestos de  $\text{Fe}^{2+}$  a  $\text{Fe}^{3+}$ , mientras que las *Acidithiobacillus thiooxidans* y *Thiobacillus thioparus* oxidan al azufre y compuestos de azufre (Sengupta, 1993; Lottermoser, 2007).

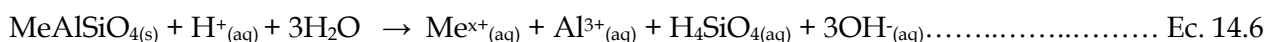
La oxidación química disminuye lentamente el pH y a valores inferiores a 4 la actividad de los microorganismos predomina en el proceso de oxidación y éste se acelera en miles de veces respecto a la velocidad de la oxidación química (Lottermoser, 2007).

### 14.2.3 Neutralización del drenaje ácido

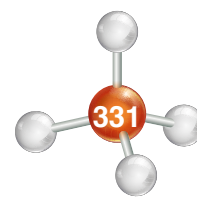
La oxidación de los sulfuros no siempre produce drenaje ácido, ya que la presencia de algunos minerales en la roca produce reacciones que neutralizan la acidez (*reacciones amortiguadoras*) mediante el consumo de iones  $\text{H}^+$ . Entre los minerales que tienen capacidad amortiguadora predominan, por su abundancia en la corteza terrestre, los silicatos (principalmente aluminosilicatos), los carbonatos y los hidróxidos (Sengupta, 1993; Blowes *et al.*, 2004; Lottermoser, 2007).

El intemperismo químico de los silicatos (olivinos, piroxenos, anfíboles, granates, feldespatos, feldespatoides, arcillas y micas) genera reacciones que consumen hidrógeno. Éstas pueden ser de dos tipos: Reacción congruente, es aquella en la que hay una disolución completa de los silicatos y producción de compuestos solubles y reacción incongruente, en la que los silicatos se alteran a otra fase mineral (Lottermoser, 2007).

Las reacciones de intemperismo congruente se pueden representar de la siguiente manera (Lottermoser, 2007):

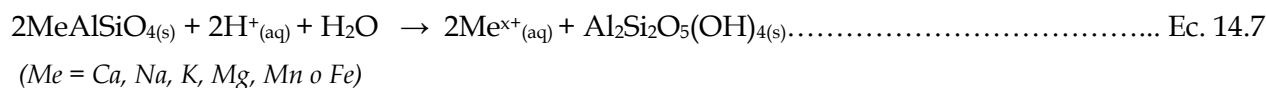


(*Me* = *Ca*, *Na*, *K*, *Mg*, *Mn* o *Fe*)

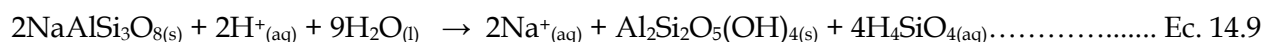
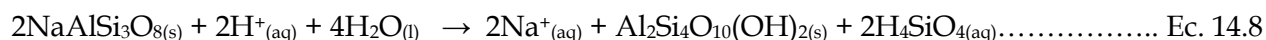




Las reacciones de intemperismo incongruente se representan por la reacción:



Por ejemplo, la disolución de la albita (Ec. 14.8 y 14.9), feldespato plagioclasa rico en sodio ( $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$ ), consume protones, produce sodio en disolución y minerales arcillosos secundarios como montmorillonita ( $\text{Al}_2\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$ ) o caolinita ( $\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$ ) (Lottermoser, 2007).



Reacciones similares a ésta ocurren con otros silicatos (Ec. 14.10 y 14.11). Por ejemplo, con la anortita ( $\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$ ), feldespato rico en calcio, o bien, con el feldespato ortoclasa ( $\text{KAlSi}_3\text{O}_8$ ), en las que también se da el consumo de protones, se producen cationes en disolución, y minerales arcillosos y se genera ácido silícico.

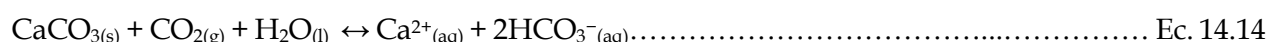


Los carbonatos juegan un papel más importante que los silicatos en el proceso de neutralización del drenaje ácido; minerales como calcita ( $\text{CaCO}_3$ ), dolomita ( $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$ ), ankerita ( $\text{Ca}(\text{Fe},\text{Mg})(\text{CO}_3)_2$ ) o magnesita ( $\text{MgCO}_3$ ) son consumidores de la acidez del agua (Blowes *et al.*, 2004; Lottermoser, 2007). El más importante de ellos es, sin duda, la calcita por su abundancia en diversos ambientes geológicos y a su velocidad de disolución comparada con los otros carbonatos.

La disolución de la calcita produce iones bicarbonato ( $\text{HCO}_3^-$ ) o ácido carbónico ( $\text{H}_2\text{CO}_3$ ), según las condiciones del medio, ligeramente ácidas a alcalinas o fuertemente ácidas, respectivamente (Ec. 14.12 y 14.13).



La disolución de la calcita depende fuertemente de la presencia o ausencia de dióxido de carbono (Younger *et al.*, 2002), propiamente si el agua está en contacto con la fase gaseosa. En sistemas abiertos, donde la calcita está en contacto con el  $\text{CO}_2$  de la atmósfera, en comparación con los sistemas cerrados, su disolución se incrementa, hay mayor producción de bicarbonatos y, por tanto, mayor consumo de iones hidrógeno (Ec. 14.14).



### 14.3 Tratamiento del drenaje ácido

#### 14.3.1 Sistemas de tratamiento pasivo

La generación de drenaje ácido, tanto en obras mineras como en depósitos de residuos de mina, ha obligado al desarrollo de sistemas de tratamiento que, de manera general, se clasifican en *activos* y *pasivos* (Younger *et al.*, 2002; López *et al.*, 2002; Johnson y Hallberg, 2005; Lottermoser, 2007). Los sistemas activos requieren del uso de algún reactivo alcalino que permita elevar el pH de la disolución y con ello remover los elementos traza por precipitación. Primordialmente se han utilizado carbonato de calcio, carbonato de sodio, hidróxido de sodio, óxido de calcio e hidróxido de calcio. Se usan en las minas cuando aún están en operación, ya que resultan sencillos y prácticos y los costos de inversión, operación y mantenimiento pueden ser absorbidos por las ganancias que se tienen de la operación misma. Sin embargo, Wolkersdorfer (2008) hace referencia a las





minas abandonadas y a la repercusión que tienen los elementos traza en los acuíferos una vez que las minas quedan fuera de operación; desde este punto de vista, los tratamientos pasivos adquieren mayor importancia debido a que, a mediano y largo plazo, resultan más eficientes y de menor costo comparados con los activos.

Los tratamientos pasivos son sistemas que utilizan materiales naturales para promover procesos químicos, físicos y biológicos que permiten la depuración de aguas contaminadas. El término de tratamiento pasivo se comenzó a utilizar justamente para el tratamiento de aguas residuales mediante humedales en la década de 1970 (Younger *et al.*, 2002) y, posteriormente, se valoró su uso potencial para el tratamiento de aguas de minas.

Dentro de las estrategias de remediación de drenaje ácido, Johnson y Hallberg (2005) hacen una división entre los abióticos y los biológicos. En los primeros se ubican los tratamientos activos descritos, que utilizan reactivos alcalinos, mientras que los sistemas pasivos utilizan rocas carbonatadas (particularmente caliza). Son tratamientos pasivos los humedales aerobios y anaerobios, las barreras reactivas permeables y los biorreactores para la oxidación del hierro. Entre los biológicos, hay tratamientos activos mediante biorreactores cerrados que utilizan microorganismos sulfatorreductores. Una clasificación similar a ésta fue hecha por Filipek *et al.* (2003).

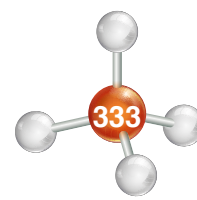
### 14.3.2 Tratamiento con rocas carbonatadas

Estos sistemas son por demás simples y consisten en canales empacados con rocas carbonatadas; se trata, particularmente, de la caliza, por su alto contenido de mineral calcita ( $\text{CaCO}_3$ ) y su presencia en diversos ambientes geológicos. Entre éstos destacan dos tipos de sistemas, los *canales anóxicos de caliza* (CANc) y los *canales abiertos de caliza* (CAbC), los cuales difieren en que el primero es un sistema cerrado, mientras que el segundo es abierto (Younger *et al.*, 2002; López *et al.*, 2002; Johnson y Hallberg, 2005).

En los CANc los huecos formados entre la roca son ocupados por el drenaje ácido, lo cual permite que permanezcan las condiciones anóxicas: el  $\text{Fe}^{2+}$  se mantiene en su forma reducida y no se produce el precipitado de hidróxidos de hierro que recubre la roca. De esta forma se alarga la vida útil de la caliza. En los sistemas cerrados, se impide el restablecimiento del equilibrio del  $\text{CO}_2$  entre la atmósfera y la disolución, lo que contribuye a mantener la alcalinidad al no haber mayor generación de ácido carbónico; en el caso de los sistemas abiertos el  $\text{CO}_2$  se mantiene en equilibrio con la atmósfera (Ec. 14.14). Estos sistemas tienen mayor eficiencia en aguas de mina con bajas concentraciones de  $\text{Fe}^{3+}$  y  $\text{Al}^{3+}$  en disolución (menos de 1 mg/L), así como baja concentración de oxígeno disuelto, ya que evitan la obstrucción del sistema por los precipitados (Younger *et al.*, 2002).

Dadas las altas concentraciones de  $\text{Fe}^{3+}$  y  $\text{Al}^{3+}$  que, generalmente, existen en las aguas ácidas de mina, los sistemas CANc son limitados para su tratamiento. Una alternativa son los CAbC en los que la neutralización se da en condiciones oxidantes y sí hay formación de hidróxidos y oxihidróxidos de hierro, los cuales, con el tiempo, pueden obstruir el flujo de agua a través de la roca y limitar la disolución de la calcita. Para mejorar la eficiencia de los CAbC se requiere mantener una velocidad del flujo suficiente para conservar en suspensión los sólidos y, así, evitar la obstrucción; Younger *et al.* (2002) señalan que son recomendables velocidades mayores a 0.1 m/min.

Ziemkiewicz *et al.* (1997) evaluaron la eficiencia de siete sistemas de canales abiertos de caliza construidos en Pennsylvania y en West Virginia, EE. UU. Estos canales tenían longitudes que van de 11 a 137 m, recibían flujos de 76 a 907 L/min, inclinaciones que iban de 9 a 60 %, tiempos de







contacto de 1 a 86 minutos y lograban remociones de acidez de 4 a 62 %. Concluyeron que en los canales había mayor eficiencia cuando su pendiente era de 20 %, suficiente para mantener en suspensión los precipitados de hierro que se forman.

Alcoela *et al.* (2012) evaluaron la eficiencia de un sistema de canales abiertos con caliza para tratar un flujo intermitente de drenaje ácido que se generaba en un depósito de jales en Cartagena, al sur de España. El sistema tenía casi 2,000 m de longitud y una pendiente promedio de 4.6 %. Se analizaron 12 eventos de lluvia de 2005 a 2009 y observaron que había un incremento gradual de pH a lo largo del canal, el cual estaba relacionado con la remoción de metales pesados (Al, Mn, Fe, Ni, Cu, Zn, As, Cd y Sb), así como con la disminución de la conductividad eléctrica (CE) y de sólidos totales (ST), K, Mg y  $\text{SO}_4^{2-}$ .

El uso de la roca caliza también ha resultado efectivo utilizando como complemento de materiales orgánicos como en el caso que reporta Macías *et al.* (2012). Primero hicieron pasar el agua ácida por un tanque en el que mezclaron roca caliza molida y viruta de madera (sustrato alcalino). Después, a través de lagunas de aireación para oxidar y precipitar el Fe en disolución. Con este sistema lograron remover el 71 % de la acidez neta, el 100 % de Fe, Al, Cu, Pb y As, y 6 % del Zn.

## 14.4 Procesos geoquímicos en la remoción de los elementos traza

### 14.4.1 Movilidad de los elementos traza

La movilidad de los *elementos traza* (metales pesados y metaloides que pueden estar presentes en disolución en un drenaje ácido) está regida, fundamentalmente, por el pH de la disolución (Reddi e Inyang, 2000; Younger *et al.*, 2002); y quizá éste sea el parámetro clave para entender el proceso de liberación de dichos elementos y determinar los mecanismos de retención para removerlos de la disolución en un sistema de tratamiento.

Las variaciones de pH determinan si un elemento puede estar en disolución (forma acuosa) o bien precipitar en forma de hidróxido, de carbonato, de sulfuro o no precipitar y quedar retenido por algún fenómeno de adsorción, co-precipitación o intercambio catiónico sobre la superficie de un mineral secundario formado en el proceso de oxidación, particularmente en los hidróxidos de hierro (Cravotta y Trahan, 1999; Romero *et al.*, 2007).

Dependiendo del pH y de las condiciones oxidantes o reductoras del medio (redox), un elemento podrá precipitar en forma de óxido, hidróxido o carbonato o bien permanecer en forma soluble. Los diagramas de Pourbaix, que relacionan el Eh (potencial de óxido-reducción) con el pH, ayudan a comprender el comportamiento de los elementos traza en la disolución cuando varían estas condiciones.

En la Figura 14.1 se muestran los diagramas Eh-pH para el aluminio y el hierro, elementos comúnmente presentes en el

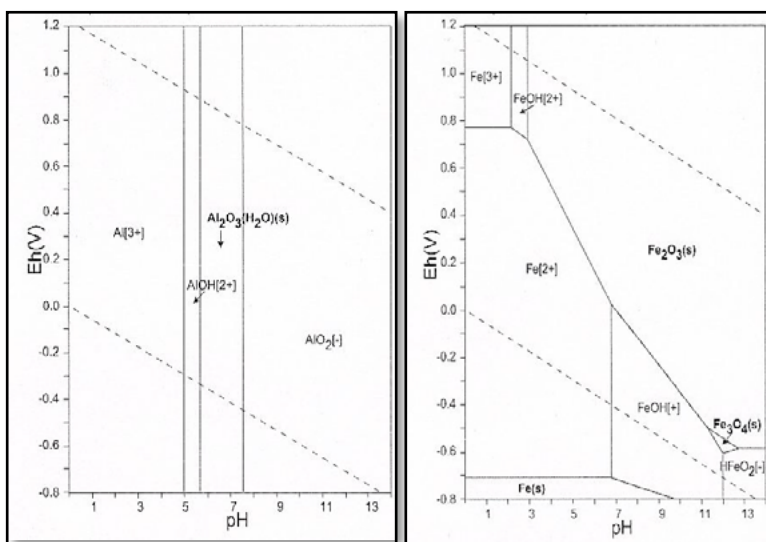


Figura 14.1. Diagramas de Pourbaix (pH-Eh) para aluminio y hierro.



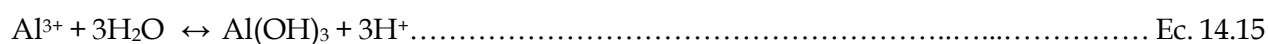
drenaje ácido. El aluminio se encuentra como  $\text{Al}^{3+}$  en disolución a valores de pH menores a 5 y, principalmente, en condiciones oxidantes; al aumentar el pH en un intervalo entre 5.4 y 7.3, precipita como hidróxido en condiciones oxidantes e, incluso, en condiciones reductoras. El caso del Fe es similar: en condiciones ácidas y fuertemente oxidantes se encuentra principalmente en disolución como  $\text{Fe}^{2+}$  y  $\text{Fe}^{3+}$ . A valores de pH mayores a 3 comienza a precipitar como hidróxido y, conforme aumenta el pH, forma óxidos de hierro, tanto en condiciones oxidantes como reductoras. En condiciones fuertemente reductoras, el Fe se encuentra como sulfuros en un intervalo de pH de ácido a neutro.

#### 14.4.2 Precipitación de hierro y aluminio

El tratamiento de un drenaje ácido, en primera instancia, pretende elevar el pH del agua y, posteriormente, remover los metales y metaloides en disolución. Tanto en los tratamientos activos como en los pasivos, la remoción de los elementos traza ocurre por procesos químicos de precipitación que se llevan a cabo cuando aumenta la alcalinidad de la disolución y, por tanto, aumenta el pH. En los tratamientos pasivos, como en el caso de los biorreactores y de los humedales (aerobios y anaerobios), también se dan procesos bióticos en los que intervienen microorganismos que promueven la retención de estos elementos en condiciones reductoras (Johnson y Hallberg, 2005).

La remoción de los elementos comúnmente presentes en el drenaje ácido, como el aluminio, arsénico, cadmio, cobre, hierro, manganeso y zinc, entre otros posibles, puede darse por procesos químicos de precipitación y esto ocurre, por supuesto, con el incremento del pH.

El aluminio se encuentra en altas concentraciones como  $\text{Al}^{3+}$  a  $\text{pH} < 4$  y es importante su remoción ya que es un elemento altamente ecotóxico en su forma acuosa. A valores mayores de  $\text{pH} > 4$  el Al precipita mediante hidrólisis como hidróxidos e hidroxisulfatos en forma sólida (Ec. 14.15) (Younger *et al.*, 2002):



A valores suficientemente altos de pH (5 a 8), el Al precipita tanto en condiciones oxidantes como reductoras. El hidróxido de aluminio casi siempre es amorfo, pero lentamente cristaliza en una de sus variedades más estables: la gibbsita ( $\text{Al}(\text{OH})_3$ ) o la bohemita ( $\text{AlO}(\text{OH})$ ).

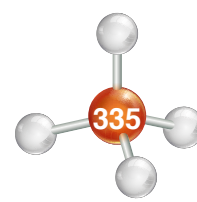
El Fe se elimina por oxidación aerobia en forma de oxihidróxidos a partir de la formación del ion férrico ( $\text{Fe}^{3+}$ ), el cual se encuentra, prioritariamente, en disolución a pH menores a 4. Al igual que el Al, el ion férrico se hidroliza para precipitar como hidróxido y oxihidróxido (Ec. 14.16):



En condiciones neutras (pH entre 6 y 8) se forman hidróxidos amorfos de hierro y goethita ( $\alpha$ - $\text{FeOOH}$ ), pero a valores mayores a 8 es más común encontrar precipitados de ferrihidrita ( $\text{Fe}(\text{OH})_3$ ). También se reporta que a valores menores de pH se puede dar la sustitución del radical  $\text{OH}^-$  por sulfato ( $\text{SO}_4^{2-}$ ) y formar oxihidroxisulfatos, como la schwartmannita ( $\text{Fe}_8\text{O}_8(\text{OH})_6(\text{SO}_4)_n\text{H}_2\text{O}$ ). Con el tiempo, los hidróxidos de hierro pierden agua y, gradualmente, recristalizan para formar hematita ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ).

#### 14.4.3 Sorción de elementos traza

La precipitación de hidróxidos y oxihidróxidos de Fe y Al a partir de la neutralización del drenaje ácido contribuye a la remoción de metales en disolución (Mn, Cu, Co, Ni y Zn) mediante procesos de adsorción o coprecipitación. Cravotta y Trahan (1999) en un sistema de tratamiento mediante canales abiertos con caliza, relacionan la disminución de estos elementos en el efluente con el





enriquecimiento relativo de los mismos en los sedimentos de hidróxidos de hierro y en el recubrimiento de la roca caliza. Por otro lado, Romero *et al.* (2007) identifican la formación de fases secundarias como yeso, goethita, hematita y k-jarosita, formando una capa cementante en la zona de oxidación de depósitos de jales y determinan que ésta juega un papel importante en la inmovilización de Zn, Cd, Cu y As mediante procesos de adsorción y coprecipitación en la superficie de los precipitados de Fe. Holmström y Öhlander (2001) estudian los oxihidróxidos de Fe y Mn formados en un depósito de jales en Suecia, los cuales retienen por adsorción y coprecipitación los metales en solución contenidos en la interface sedimento-agua cuando el depósito es inundado con agua.

En las aguas ácidas, el Zn está presente en disolución principalmente como  $Zn^{2+}$  (Nuttall y Younger, 2000; Younger *et al.*, 2002; Mayes *et al.*, 2009) y puede removerse al aumentar la alcalinidad como hidróxido (Ec. 14.17):



Sin embargo, en aguas netamente alcalinas, el zinc se presenta principalmente en forma de carbonatos ( $ZnCO_3$ ) que difícilmente reaccionan para formar otro compuesto. La precipitación del zinc comienza a valores de pH superiores a 7, aunque la condición óptima para la precipitación de carbonatos e hidróxidos es 8.2.

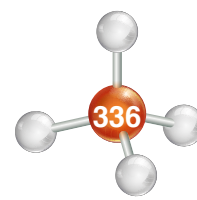
El manganeso es un elemento de mayor complejidad para remover del drenaje ácido; en el medio acuoso, principalmente, está en forma de  $Mn^{2+}$  y para precipitarlo se requiere primero de una oxidación a  $Mn^{4+}$  y, posteriormente, de una reacción de hidrólisis para precipitarlo como óxido (Ec. 14.18 y 14.19):



Dado que la velocidad de oxidación del  $Mn^{2+}$  es muy lenta a valores de pH menores a 8, se considera que en esta condición la oxidación se da por el efecto catalítico de microorganismos (Younger *et al.*, 2002). Luan *et al.* (2012) realizaron experimentos con muestras de sedimentos y DAM de sistemas de tratamiento instalados en Pennsylvania y en Tennessee, EE.UU: esterilizaron unas muestras e inhibieron en ellas la actividad de microorganismos y, en otras, promovieron su crecimiento; sus resultados muestran que en estas últimas se incrementó la velocidad de remoción y se alcanzó entre el 63 y 99% de eliminación del Mn.

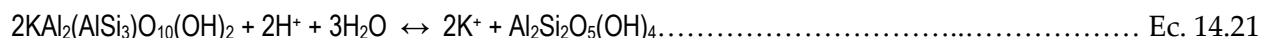
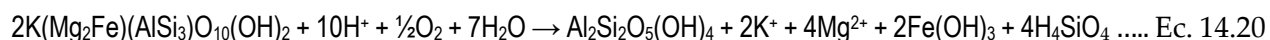
Los metales divalentes como el Cu y el Cd están en forma acuosa en condiciones oxidantes y ácidas; sin embargo, precipitan como hidróxidos con el incremento del pH, el cobre a valores superiores a 5.5 y el cadmio en condiciones alcalinas superiores a 9. De acuerdo con Lee *et al.* (2002) estos elementos, junto con el Zn, también pueden ser removidos por coprecipitación en precipitados de Fe, Al y Mn formados después de la neutralización (schwermannita y ferrihidrita en el caso del Fe y precipitados amorfos en el caso del Al y Mn). En ese estudio determinaron que los valores de pH, para lograr un 50% de remoción de estos elementos, variaba: el cobre de 4.6 a 6.1; el zinc de 5.6 a 7.5 y cadmio de 5.5 a 7.7.

Además de la importancia de los precipitados de hierro y aluminio en la remoción de elementos traza, es interesante la alteración de los aluminosilicatos contenidos en la roca durante la neutralización del drenaje ácido, particularmente de los filosilicatos. Estos minerales sufren un proceso de intemperismo por la acción del agua, la cual promueve el consumo de iones hidrógeno (Langmuir, 1997; Appelo y Postma, 2005).





La disolución de la mica biotita (Ec. 14.20) (Appelo y Postma, 2005) y de la moscovita (Ec. 14.21) (Langmuir, 2007), producen fase arcillosa como clorita e illita, respectivamente, de acuerdo con las siguientes reacciones:



A su vez, estas fases minerales secundarias también tienen capacidad de atraer iones en disolución y retenerlos por fenómenos de sorción. Por ejemplo, la caolinita, la illita, la montmorillonita y la smectita (Gu y Evans, 2007; Turan, *et al.*, 2011).

## 14.5 Caso de aplicación

### 14.5.1 Sitio de estudio

Este trabajo es producto de una investigación realizada en una mina de México en la que se explota un yacimiento de sulfuros masivos de Zn- Pb-Cu con valores de Ag y Au.

La mineralización del yacimiento está constituida por sulfuros: el más abundante es la pirita ( $FeS_2$ ) como mineral de ganga; mientras que la mena está constituida por esfalerita (ZnS), galena (PbS) y calcopirita ( $CuFeS_2$ ). Los principales minerales de ganga, además de la pirita, son: cuarzo, sericita, moscovita, clorita, biotita, grafito, calcita, rutilo, turmalina y arsenopirita.

En la geología local afloran principalmente rocas jóvenes del cuaternario; andesitas basálticas al oeste y noroeste, basaltos de olivino al este y noroeste, depósitos lacustres al sur. Las rocas que cubren al yacimiento son filita y esquistos de clorita y sericita. Y en una zona cercana hay un afloramiento de roca caliza.

Dentro de la mina hay presencia de escurrimientos de agua ácida en obras antiguas fuera de operación. En los puntos donde se genera el DAM, el pH del agua varía de 2.43 a 3.05 y tiene concentraciones significativas de Al, Fe, Cu, Cd, Mn, Zn y  $SO_4^{2-}$ , todos en forma acuosa.

La presencia de roca filita, con importante contenido de calcita ( $CaCO_3$ ), así como de roca caliza que aflora cerca de la mina, hacen posible considerar su uso en un sistema de tratamiento pasivo, que permita controlar el drenaje ácido a un bajo costo y con requerimientos mínimos de mantenimiento. Un sistema pasivo que pueda adaptarse a las condiciones de operación de la mina sería una buena alternativa en el largo plazo.

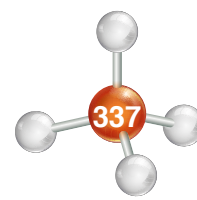
### 14.5.2 Objetivo

El objetivo general del proyecto de investigación fue desarrollar un sistema de tratamiento con el uso de rocas carbonatadas que permitiera la neutralización del drenaje ácido generado dentro de la mina y la remoción de los metales pesados contenidos.

### 14.5.3 Metodología

La investigación fue dividida en cuatro etapas: inició con la definición del problema en la mina, después se hizo un trabajo de laboratorio a pequeña escala con pruebas en matraces, posteriormente se continuó en el laboratorio con pruebas en una celda de acrílico y, finalmente, se hizo el desarrollo de un prototipo para proponer pruebas a nivel piloto en la mina.

A continuación, serán presentados sólo algunos de los resultados de la investigación que ilustran los procesos geoquímicos que ocurren en la neutralización del drenaje ácido con rocas carbonatadas.







## 14.6 Resultados y discusión

### 14.6.1 Caracterización del DAM

Durante los recorridos efectuados en la mina fueron localizados los sitios donde se genera DAM. Los valores de pH medidos directamente en los sitios van de 2.43 a 3.05. Fueron tomadas cuatro muestras de DAM en diferentes lugares para su caracterización.

En el laboratorio se determinaron el pH y la conductividad eléctrica (CE) y los elementos traza (Al, As, Cd, Cu, Fe, Mn, Pb, Sb, Si, Se, y Zn) por espectrometría de emisión óptica de plasma acoplada por inducción (ICP-EOS) y los iones mayores ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{F}^-$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{NO}_3^-$  y  $\text{SO}_4^{2-}$ ) por cromatografía iónica. También se determinaron bicarbonatos  $\text{HCO}_3^-$  por el método de titulación (Tabla 14.1).

Muestra	pH	CE (mS/cm)	Al	Cd	Cu	Fe	Mn	Si	Zn
			mg/L						
Arroyo	7.38	0.07	<LD	<LD	<LD	<LD	<LD	9.25	<LD
DA 6	2.44	11.31	41.0	5.8	11.6	562.9	41.1	35.4	482.9
DA 6 - A	2.53	8.02	36.4	5.1	12.1	527.1	37.0	32.0	470.6
Pileta	2.90	4.72	8.6	2.3	2.5	178.4	25.8	16.6	363.3
DA 8	3.38	1.87	<LD	0.2	<LD	0.3	3.8	8.0	77.1

LD (mg/L): Al (0.08), Cd (0.02), Cu (0.12), Fe (0.01), Mn (0.01), Si (0.01) y Zn (0.01)

Tabla 14.1. Concentración de elementos traza en las muestras de drenaje ácido.

Por los valores de pH, el agua puede ser considerada como fuertemente ácida y la alta conductividad eléctrica refleja un elevado contenido de iones en disolución. Los elementos que están en concentraciones significativas son el Al, Fe, Cu, Cd, Mn y Zn, comparadas con valores del agua natural en la zona (muestra Arroyo). Los elementos que están en bajas concentraciones son Be, Co, Li, Ni, Pb y Sr. También se analizaron As, Cr, Mo, Sb, Se, Ti, Tl y V; sin embargo, su contenido está por debajo del límite de detección de la técnica de análisis empleada.

Los resultados del análisis de iones mayores indican que el  $\text{Na}^+$  se presenta de 113.64 a 354.46 mg/L, el  $\text{K}^+$  de 3.5 a 20.98 mg/L,  $\text{Ca}^{2+}$  de 251.97 a 437.94 mg/L,  $\text{Mg}^{2+}$  de 379.59 a 1,673.51 mg/L y  $\text{SO}_4^{2-}$  de 2,896.47 a 16,555.29 mg/L. En todas las muestras hay ausencia de bicarbonatos  $\text{HCO}_3^-$ .

### 14.6.2 Caracterización de la roca

Dentro de la mina fueron tomadas dos muestras de roca filita (F1 y F2) y, fuera, una muestra de roca caliza en el afloramiento (C1). La composición mineralógica fue determinada por microscopía óptica (luz paralela y nicols cruzados) y por difracción de rayos X (DRX). La composición química fue obtenida por fluorescencia de rayos X (FRX) para los elementos mayores y elementos traza.

Con microscopía óptica se determinaron las fases minerales dominantes, las cuales fueron confirmadas posteriormente con la DRX. En la roca caliza la matriz es calcárea (calcita), con cuarzo, plagioclasas intermedias de sodio y calcio, moscovita, biotita, clorita y minerales opacos. La presencia de la calcita es importante, puesto que es el mineral con mayor potencial para neutralizar la acidez del agua; también los filosilicatos, como la moscovita, la biotita y la clorita, son relevantes porque participan en la neutralización y porque con ellos se forman fases arcillosas que ayudan a retener los elementos traza en disolución.

Se determinó el potencial de neutralización de la roca con la metodología establecida en la NOM-141-SEMARNAT-2003 (Semarnat, 2004), que es una prueba de balance ácido-base que se aplica a los jales mineros para determinar si serán o no generadores de drenaje ácido. Conforme a los resultados obtenidos, la roca caliza contiene de 598 a 762 kg de  $\text{CaCO}_3$ /ton de roca, mientras que la filita tiene de 334 a 408 kg de  $\text{CaCO}_3$ /ton de roca. La cantidad necesaria de carbonato de calcio para neutralizar un litro de drenaje ácido es de 5.8 g, por lo que un kilogramo de roca caliza





permite el tratamiento de 131 L de DAM y un kilogramo de roca filita permite tratar de 57 (F2) a 70 L (F1).

### 14.6.3 Neutralización de DAM con las rocas

Durante la primera etapa experimental fueron realizadas diversas pruebas de neutralización en matraces Erlenmeyer de 250 mL de capacidad, mediante agitación de la roca en contacto con drenaje ácido a 200 rpm y fueron evaluados los parámetros que ejercen mayor influencia en la eficiencia del tratamiento: a) tamaño de roca (2.00 mm, 2.36 mm y 3.35 mm), b) relación roca/DAM (1/20, 1/10 y 1/5) y tiempo de agitación (18, 24 y 36 horas).

Con estos resultados se elaboró un diseño experimental diferente para la siguiente etapa de pruebas. Se propuso una agitación en dos pasos: el primero con filita para remover Al, Fe y Cu, y el segundo con caliza para incrementar aún más el pH y remover Cd, Zn y Mn. En el primer paso se usó filita de 3.35 mm y un tiempo de agitación de 3 horas; en el segundo paso se usó caliza de 0.85 mm y un tiempo de 24 horas. La relación roca/DAM fue 1/5.

La Tabla 14.2 muestra los resultados de la prueba realizada con la muestra DA-P. En el primer paso de agitación se logró aumentar el pH de 2.74 en la muestra DA-P1 (agua ácida inicial) a valores entre 5.0 y 6.67 en los matraces con roca. En la segunda agitación conti-nuó elevándose el pH y se alcanzan valores finales entre 7.26 y 7.64. Este incremento demuestra claramente la capacidad que tienen las rocas carbonatadas para neutralizar la acidez del DAM.

1er Paso de Agitación					2o Paso de Agitación				
Muestra	pH	Al mg/L	Fe mg/L	Cu mg/L	Muestra	pH	Al mg/L	Fe mg/L	Cu mg/L
DA-P1	2.74	18.99	111.88	2.29	PF1-2	7.26	<LD	<LD	<LD
PF1	6.64	<LD	<LOD	<LD	PF2-2	7.33	<LD	<LD	<LD
PF2	5.00	<LD	<LD	<LD	PF2-D2	7.64	<LD	<LD	<LD
PF2-D	6.67	<LD	<LD	<LD					

LD (mg/L): Al (0.08), Fe(0.01), Cu ( 0.122)

1er Paso de Agitación					2o Paso de Agitación				
Muestra	pH	Cd mg/L	Mn mg/L	Zn mg/L	Muestra	pH	Cd mg/L	Mn mg/L	Zn mg/L
DA-P1	2.74	2.19	23.14	319.68	PF1-2	7.26	0.06	2.36	13.89
PF1	6.64	1.29	15.60	205.47	PF2-2	7.33	<LD	1.37	1.31
PF2	5.00	<LD	19.68	258.61	PF2-D2	7.64	<LD	2.25	2.23
PF2-D	6.67	2.17	25.96	311.44					

LD (mg/L): Cd (0.02), Mn (0.007), Zn (0.007)

Tabla 14.2. Concentraciones de elementos traza después de los 1º y 2º pasos de agitación.

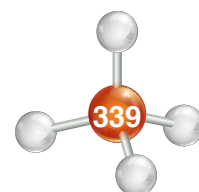
En la neutralización del drenaje ácido también es importante observar la ocurrencia de los procesos geoquímicos que controlan la movilidad de los elementos traza, ya que, conforme aumenta el pH, gran parte de estos elementos queda retenida en los sedimentos que se forman.

En la primera agitación fue removida la totalidad de Al, Fe y Cu, ya que el análisis de las muestras indica que las concentraciones medidas están por debajo del límite de detección (<LD) de la técnica de análisis.

En aguas ácidas de mina, el Al precipita principalmente en forma de hidroxisulfatos, de acuerdo con la reacción (Ec. 14.22) (Sánchez *et al.*, 2016).



Los hidroxisulfatos de Al más comunes son la basaluminita (Al<sub>4</sub>(SO<sub>4</sub>)(OH)<sub>10</sub> · 5H<sub>2</sub>O) y alunita (KAl<sub>3</sub>(SO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>(OH)<sub>6</sub>) debido a la alta concentración de iones sulfato (Nordstrom, 1982; Blowes *et al.*, 2004; Jones *et al.*, 2011; Acero *et al.*, 2015).





El Fe es eliminado por oxidación formando oxihidróxidos a partir de la precipitación del ion férrico (Fe<sup>3+</sup>) (Ec. 14.23); sin embargo, a valores bajos de pH se puede dar la sustitución del radical OH<sup>-</sup> por sulfato (SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>) (Ec. 14.24) (Lotermoser, 2007). Los principales hidroxisulfatos que se forman son la schwartmannita (Fe<sub>8</sub>O<sub>8</sub>(OH)<sub>6</sub>(SO<sub>4</sub>)-nH<sub>2</sub>O) (Younger *et al.*, 2002), la coquimbita (Fe<sub>2</sub><sup>3+</sup>(SO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>·9H<sub>2</sub>O), la melanterita (Fe<sup>2+</sup>SO<sub>4</sub>·7H<sub>2</sub>O) y la rozenita (Fe<sup>2+</sup>SO<sub>4</sub>·4H<sub>2</sub>O) (Blowes *et al.*, 2004).



La remoción completa del Cu ocurre también a valores de pH entre 3 y 5, y puede estar asociada a procesos de sorción en los hidroxisulfatos de hierro y aluminio. En el tratamiento de aguas ácidas de mina y en depósitos de residuos mineros, se ha reportado la retención de metales divalentes por procesos de sorción (Cravotta y Trahan; 1999; Holmström y Öhlander, 2001; Lee *et al.*, 2002; Simón *et al.*, 2005; Romero *et al.*, 2011).

En la primera agitación también hay una ligera remoción de Cd, entre 9 y 41 % (con 100 % en la muestra PF2) y de Zn entre 2 y 12 %. Esta retención de elementos está asociada con una adsorción sobre los hidroxisulfatos de hierro, ya que la precipitación química de estos elementos en forma de hidróxidos ocurre por arriba de pH 7.

En la segunda agitación, ya con valores de pH superiores a 7, se logró la remoción del 100% de Cd, de 95 a 99 % de Zn y de 89 a 94 % de Mn. Este fenómeno puede estar asociado en su mayor parte con la adsorción en los hidroxisulfatos de hierro y aluminio, ya que el valor de pH máximo alcanzado es de 7.64 y para la precipitación del zinc y manganeso en forma de hidróxidos se requiere estar por arriba de 8. Autores como Lee *et al.* (2002), Simón *et al.* (2005), Romero *et al.* (2007) y Miller *et al.*, (2011) reportan la adsorción y/o coprecipitación de Zn en hidroxisulfatos de hierro y aluminio. En cuanto al Mn, Younger *et al.* (2002), Silva *et al.* (2010) y Luan *et al.* (2012) refieren que la precipitación del Mn, como hidróxido, sólo ocurre arriba de un pH de 8.

También es posible que la retención de estos elementos esté asociada con las arcillas formadas por la descomposición de los filosilicatos. En la neutralización del drenaje ácido también participan los filosilicatos contenidos en la roca, lo cual produce fases arcillosas que pueden promover fenómenos de adsorción como sugieren Gu y Evans, (2007) y Turan *et al.* (2011). La carga negativa que adquieren estos minerales en su superficie a los valores de pH alcanzado desde la primera agitación, hace posible que también atraigan a los metales divalentes (Langmuir, 1997; Appelo y Postma, 2005).

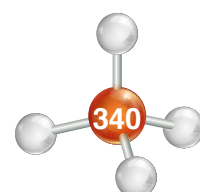
#### 14.6.4 Sedimentos formados en la neutralización

En la formación de sedimentos, durante la neutralización, también ocurren procesos geoquímicos que contribuyen a la inmovilización de los elementos traza. En la Tabla 14.3 se muestran las concentraciones de

elementos traza determinadas en los sedimentos de las rocas filita (F1 y F2) y caliza (CF1 y CF2), y se comparan con los contenidos iniciales que tienen las rocas; es decir, antes de ser utilizadas en la neutralización del drenaje ácido.

	Concentraciones en mg/kg							
	F1		CF1		F2		CF2	
	Roca	Sedimento	Roca	Sedimento	Roca	Sedimento	Roca	Sedimento
Al	1 180	7 767	1 065	2 031	1 178	7 570	1 160	1 882
Cd	<0.02	45	<0.02	247	<0.02	47	<0.02	252
Cu	36	709	1	19	59	625	6	78
Fe	19 049	119 866	6 409	6 682	21 415	111 207	6 198	6 885
Mn	740	298	998	2 382	771	411	1 013	2 421
Zn	721	9 545	714	13 419	690	9 880	1 045	13 470

Tabla 14.3. Concentraciones de elementos traza en las muestras de roca y sedimentos.





En el caso del Al, Fe y Cu se concentran mayormente en el sedimento de la roca filita en la primera agitación; el Al de un contenido promedio de 1,179 mg/kg en la roca aumenta a un promedio de 7,768 mg/kg en el sedimento, el Fe pasa de 20,232 mg/kg en la roca a 115,536 mg/kg en el sedimento y el Cu de 47 mg/kg a 667 mg/kg. En cambio, para el Cd, Zn y Mn la mayor concentración se da en el sedimento de la roca caliza producto de la segunda agitación; el Cd, con una concentración promedio <0.02 mg/kg, en la caliza aumenta a 249 mg/kg promedio en el sedimento, el Zn de 702 mg/kg en la roca a 13,444 mg/kg en el sedimento y el Mn de 1,005 mg/kg a 2,401 mg/kg.

La retención de los elementos metálicos en los sedimentos se asocia con las fases minerales formadas. En la Tabla 14.4 se muestran los resultados de la DRX en muestras de sedimentos obtenidas con la roca filita (primera agitación) y con roca caliza (segunda agitación). Entre los resultados destaca la presencia de hidrosulfatos de hierro como copiapita ((Fe, Mg)Fe<sub>4</sub>(SO<sub>4</sub>)<sub>6</sub>(OH)<sub>2</sub>•20H<sub>2</sub>O), jarosita (KFe<sup>3+</sup>(OH)<sub>6</sub>(SO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>) y melanterita (Fe(SO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>•7H<sub>2</sub>O), los cuales están relacionados con la retención del Cu, Cd, Mn y Zn por adsorción o coprecipitación. Igualmente es observable la presencia de fases intermedias arcillosas como illita (K<sub>0.6</sub>(H<sub>3</sub>O)<sub>0.4</sub>Al<sub>1.3</sub>Mg<sub>0.3</sub>Fe<sup>2+</sup><sub>0.1</sub>Si<sub>3.5</sub>O<sub>10</sub>(OH)<sub>2</sub>•(H<sub>2</sub>O)) que también puede estar participando en la adsorción de los metales divalentes.

Los sedimentos de la primera y segunda agitación fueron analizados por microscopía electrónica de barrido, acoplada a espectrometría de rayos X por energía dispersa (MEB-EDS). La Figura 14.2 ofrece una microfotografía del sedimento obtenido con la roca filita. Se observan tres asociaciones principales: la primera es la del Ca-S, propia del yeso, formada de manera abundante durante la neutralización por la alta presencia de SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> y Ca<sup>2+</sup> en el DAM. La segunda es la asociación del K-Fe-S, que corresponde a la formación de jarosita, o de otro hidrosulfato (Fe-S). La presencia de Zn en esta asociación confirma la ocurrencia de la adsorción de este elemento sobre el hidrosulfato, aunque también puede ser una coprecipitación. La tercera asociación importante es la de Si-Al-Fe-K, correspondiente a un filosilicato o fase arcillosa (illita), identificada por DRX. La asociación de estos elementos con el Zn confirma una adsorción de Zn en la arcilla formada.

La Figura 14.3 corresponde a una microfotografía de la muestra del sedimento de la roca caliza. En esta imagen nuevamente está presente la asociación

Muestras de Sedimentos	
Clave	Fases minerales
Filita	Yeso: Ca (SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> 2H <sub>2</sub> O
	Plagioclasa de composición intermedia: (CaNa)(SiAl) <sub>4</sub> O <sub>8</sub>
	Cuarzo: SiO <sub>2</sub>
	Filosilicatos a ≈10Å (pbb mica o illita)
	Filosilicatos a ≈14Å (pbb clorita)
	Copiapite: (Fe, Mg)Fe <sub>4</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>6</sub> (OH) <sub>2</sub> - 20H <sub>2</sub> O
Caliza	Trazas de jarosita: KFe <sup>3+</sup> <sub>3</sub> (OH) <sub>6</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>
	Trazas de melanterita: Fe (SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> 7H <sub>2</sub> O
	Hematita: Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
	Yeso: Ca (SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> 2H <sub>2</sub> O
	Calcita: CaCO <sub>3</sub>
	Plagioclasa de composición intermedia: (CaNa)(SiAl) <sub>4</sub> O <sub>8</sub>
	Cuarzo: SiO <sub>2</sub>
	Filosilicatos a ≈10Å (pbb mica-illita)
	Filosilicatos a ≈14Å (pbb clorita)
	Copiapita: (Fe, Mg)Fe <sub>4</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>6</sub> (OH) <sub>2</sub> - 20H <sub>2</sub> O

Tabla 14.4. Fases minerales identificadas en sedimentos por DRX.

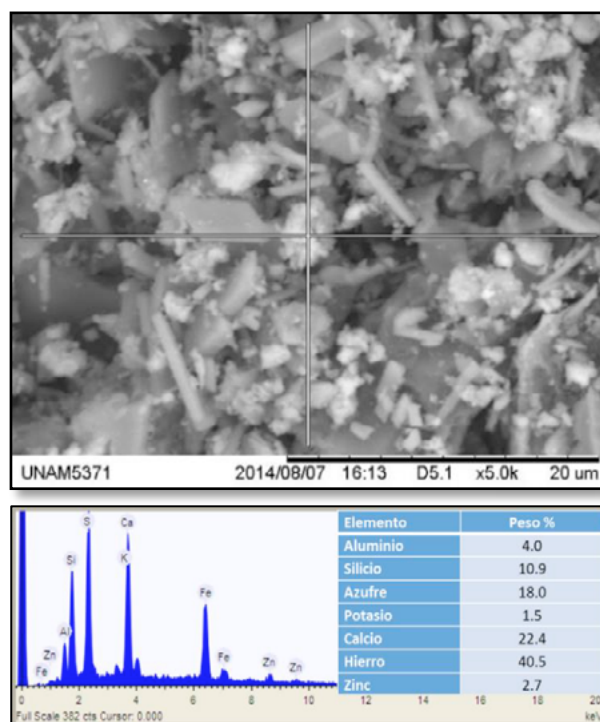


Figura 14.2. Fotomicrografías por MEB-EDS de la muestra de sedimento de la roca filita.



de Ca-S propia del yeso, pero resulta más relevante la asociación de Zn-Fe-S que ilustra la retención del Zn en un hidroxisulfato de hierro. También está la asociación de Si-Al-Mg-Zn, que corresponde a la fase arcillosa illita reteniendo al Zn por adsorción.

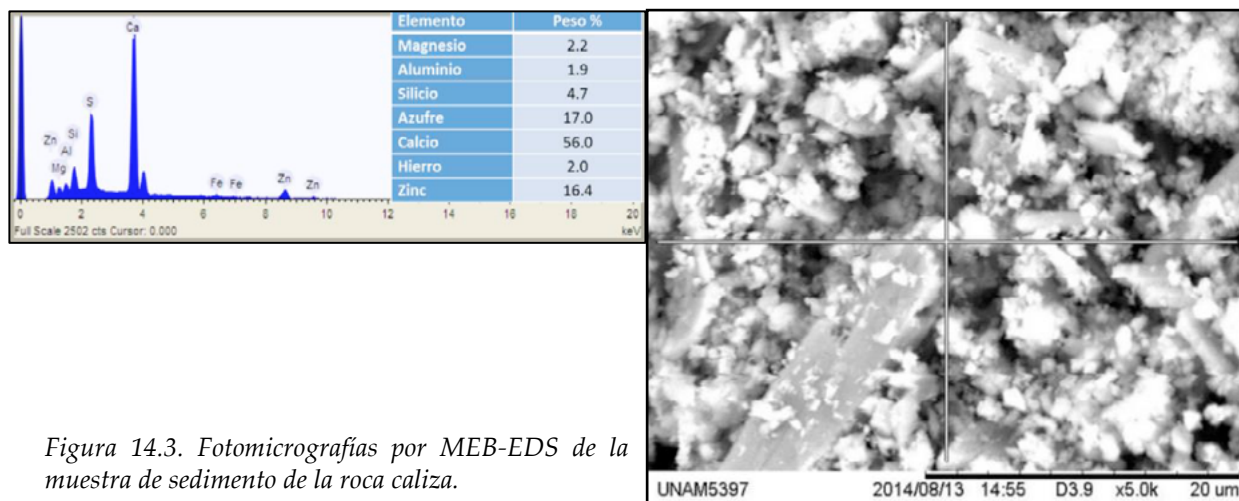


Figura 14.3. Fotomicrografías por MEB-EDS de la muestra de sedimento de la roca caliza.

## 14.7 Conclusiones

La generación de drenaje ácido de mina es un fenómeno natural que se puede presentar en las operaciones mineras donde se explotan minerales de sulfuro. La liberación del agua ácida con altos contenidos de elementos traza en disolución y una alta carga de sulfatos, representan un riesgo para el ambiente si no se toman medidas adecuadas para su control.

El caso de estudio presentado es un ejemplo de las situaciones a las que se enfrentan investigadores e ingenieros en la práctica de la extracción de minerales y que es necesario resolver a fin de evitar daños al ambiente por una actividad básica en el desarrollo del país: la minería.

Los sistemas de tratamiento con rocas carbonatadas, (filita y caliza), constituyen una alternativa interesante para controlar el drenaje ácido y evitar la afectación de suelos y cuerpos de agua, subterráneos y superficiales. El estudio de los procesos geoquímicos que ocurren durante la neutralización del drenaje ácido utilizando rocas carbonatadas, es importante porque permite explicar los fenómenos naturales que ocurren y que inmovilizan los elementos traza contenidos en el agua.

A nivel mundial, iterativamente se ha utilizado este tipo de tratamiento, pero aún hay mucho por investigar para construir sistemas más eficaces y de bajo costo. Esto abre un interesante campo de trabajo para futuros profesionales del área de las Ciencias de la Tierra.

## 14.8 Agradecimientos

La investigación a la que se hace referencia en este capítulo se llevó a cabo mediante el Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT IN 114716) de la UNAM y gracias a las facilidades brindadas por Minera Tizapa, S.A. de C.V., empresa del Grupo Peñoles.





# Capítulo 15

## Análisis Hidrogeoquímico en una localidad de Veracruz

Alberto Arias Paz, Gabriel Salinas Calleros

### 15.1 Introducción

El siguiente estudio ejemplifica una aplicación de la Química en las Ciencias de la Tierra. Es el resultado de un proyecto hidrogeológico-geofísico realizado en el año 2016 por académicos de la División de Ingeniería en Ciencias de la Tierra, UNAM y consiste en la localización del sitio más adecuado para perforar un pozo abastecedor de agua de buena calidad para la comunidad El Palmar localizada en el municipio de Papantla en el estado de Veracruz. Una de las principales actividades consistió en el muestreo e interpretación de análisis químicos de agua de 5 norias (pozos someros excavados a mano), que sirvieron para caracterizar las familias de aguas que circulan en el subsuelo de dicha localidad. Representa un ejemplo práctico en el área de hidrogeología con aplicaciones en hidrogeoquímica.

#### Sumario

##### 15.1 Introducción

##### 15.2 La calidad del agua

##### 15.3 Conceptos hidrogeológicos fundamentales

##### 15.4 Caso de estudio

##### 15.5 Presentación de resultados

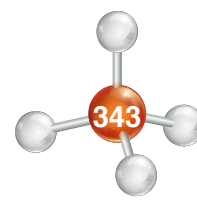
##### 15.6 Conclusiones

### 15.2 La calidad del agua

La composición química del agua dentro de un acuífero es modificada en el momento que la interacción agua - roca desde la zona de recarga. Ya en el medio subterráneo, el agua tiene la capacidad de poner en solución sustancias sólidas que toma del medio geológico, algunas de ellas llegan a quedar en su molécula como trazas disueltas, mientras que otras llegan a presentarse en altas concentraciones; generalmente estas sustancias disueltas naturales quedan en estado iónico. Algunos de estos iones se encuentran disueltos casi siempre y su suma representa prácticamente el total de iones presentes por lo que se les denomina iones fundamentales o mayores, por lo que en ellos descansa prácticamente el estudio de la calidad del agua subterránea de este capítulo.

El proceso de disolución de minerales es el fenómeno químico más común y queda vigente con el incremento de sólidos totales (STD) en el trayecto del agua en el acuífero. Sin embargo, existen otros procesos químicos que también pueden presentarse en el recorrido del agua subterránea como son: Intercambio iónico, oxidación - reducción, difusión, mezcla, dilución, fijación y adsorción, entre otros.

La caracterización hidrogeoquímica de acuíferos, inicia con el muestreo de captaciones de agua subterránea en campo y análisis físico-químicos cuyos resultados se utilizan para obtener la clasificación geoquímica mediante diagramas y zonificación en mapas del área objeto de estudio.







La calidad del agua subterránea es un atributo definido socialmente en función del uso que se le va a dar, donde para cada uno de ellos se requiere de una determinada calidad. Por lo anterior, para evaluar dicha calidad del agua, es necesario considerar para el caso particular de este capítulo, el contexto del uso potable que tendrá que referirse a la normatividad aplicable.

Parámetros como la Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO) y la Demanda Química de Oxígeno (DQO) se utilizan para determinar la cantidad de materia orgánica presente en los cuerpos de agua provenientes principalmente de las descargas de aguas residuales, de origen municipal y no municipal. Por otro lado, los Sólidos Suspendidos Totales (SST) tienen su origen en las aguas residuales y la erosión del suelo. El incremento de los niveles de SST hace que un cuerpo de agua pierda la capacidad de soportar la diversidad de la vida acuática. Estos parámetros permiten reconocer condiciones de agua relativamente natural o sin influencia de la actividad humana, hasta agua que muestra indicios o aportaciones importantes de descargas de aguas residuales municipales y no municipales, así como áreas con deforestación severa.

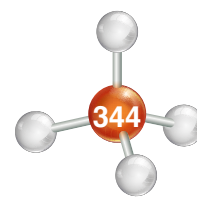
Por algún tiempo, en México, se utilizó el Índice de Calidad del Agua (ICA) como un parámetro para calificar el estado de los cuerpos de agua. Sin embargo, su uso se volvió complicado ya que la determinación de 18 parámetros resultaba costosa y los resultados que se obtenían no permitían distinguir en realidad el estado de los cuerpos de agua. Además, se obtenía que muchos cuerpos de agua no pudieran calificarse aptos para su uso, debido a la mayor importancia que se daba a los parámetros dirigidos a la protección de la vida acuática.

Otra referencia ampliamente utilizada en México para evaluar la calidad del agua se refiere a los Criterios Ecológicos de Calidad del Agua CE-CCA-001/89. Dichos criterios fueron publicados inicialmente en la Gaceta Ecológica editada por la Secretaría de Desarrollo Urbano y Ecología (SEDUE) y, posteriormente, el 13 de diciembre de 1989, en el Diario Oficial de la Federación (DOF).

Estos criterios debían reflejar con precisión los últimos conocimientos científicos relativos al tipo y alcance de los efectos identificables en la salud y el ambiente que se pudieran esperar por la presencia de contaminantes en cuerpos de agua, incluidos los acuíferos. Además, debían incluir los últimos conocimientos relativos a la concentración y la dispersión de contaminantes, o sus productos derivados, a través de procesos biológicos, físicos y químicos. Por último, señalar los efectos de los contaminantes en las comunidades biológicas, la productividad y la estabilidad, incluyendo información sobre los factores que afectaban las tasas de eutrofización y sedimentación orgánica e inorgánica.

En lo que se refiere al agua de fuentes de abastecimiento público, se considera que es de buena calidad cuando está exenta de sustancias y microorganismos que sean peligrosos para los consumidores y libre de sustancias que transmitan sensaciones sensoriales desagradables para el consumo humano, como el color, el olor, el sabor o turbiedad. Los estándares de calidad para este tipo de uso se establecen sobre la base de características microbiológicas, físicas y organolépticas, contenido de constituyentes químicos y características radiactivas.

En el caso de México, la "MODIFICACIÓN a la Norma Oficial Mexicana NOM-127-SSA1-1994, Salud ambiental. Agua para uso y consumo humano. Límites permisibles de calidad y tratamientos a que debe someterse el agua para su potabilización" es la norma que regula las características bacteriológicas, físicas y organolépticas, químicas y radioactivas del agua para consumo humano. Esta norma puede ser consultada en el DOF, del 22 de noviembre de 2000.





### 15.2.1 Objetivo

Presentar un caso-estudio de proyecto hidrogeológico en el que se realizaron análisis químicos de agua subterránea, útiles para determinar su comportamiento químico y caracterizar las diferentes familias, de acuerdo con la concentración de los iones mayores predominantes, así como equiparar los resultados con las normas de potabilidad vigentes.

## 15.3 Conceptos hidrogeológicos fundamentales

### 15.3.1 Hidrogeoquímica

La hidrogeoquímica estudia las propiedades químicas del agua superficial y de la subterránea y su relación con la geología regional, de forma que analiza los iones disueltos y los procesos de interacción agua-sólido. El agua constituye el disolvente más universal, por tanto, es capaz de incorporar gran cantidad de sustancias al estar en contacto con las diferentes litologías por las cuales circula en la escala del tiempo.

### 15.3.2 Agua subterránea

Es el agua que existe bajo la superficie del terreno, situada bajo el nivel freático y que está saturando completamente los poros y fisuras del terreno. Se renueva de manera constante de manera natural (recarga). Esta recarga procede, principalmente, de la precipitación, pero también puede producirse a partir de escurrimiento superficial, de acuíferos someros o por retornos de ciertos usos (riego de zonas agrícolas y/o recarga incidental por fugas en tuberías en prácticamente todas las zonas urbanas).

El agua subterránea en los acuíferos granulares, se desplaza de forma muy lenta comparativamente con el desplazamiento del agua superficial, su velocidad normal, varía de algunos centímetros a varias decenas de metros ya sea en un día o en un año. Sólo en el caso de acuíferos emplazados en rocas carbonatadas (kársticos) y en rocas volcánicas fracturadas se desarrollan velocidades mayores en proporciones de diez a cien veces más, igualando incluso a las registradas en corrientes superficiales.

### 15.3.3 Sustancias disueltas en el agua subterránea

La calidad del agua subterránea depende de la concentración de sustancias disueltas, mismas que se encuentran en estado iónico. Los iones más comunes cuya suma representa casi la totalidad de los iones presentes, son los iones fundamentales (constituyentes mayores) quienes desarrollan los procesos hidrogeoquímicos. Estos iones son: cloruro ( $\text{Cl}^-$ ), sulfato ( $\text{SO}_4^{2-}$ ) bicarbonato, ( $\text{HCO}_3^-$ ), sodio ( $\text{Na}^+$ ), calcio ( $\text{Ca}^{2+}$ ) y magnesio ( $\text{Mg}^{2+}$ ).

Es frecuente que los aniones nitrato ( $\text{NO}_3^-$ ) y carbonato ( $\text{CO}_3^{2-}$ ) y el catión potasio ( $\text{K}^+$ ) se consideren dentro del grupo de iones fundamentales aun cuando su proporción es menor.

Adicionalmente, existen disueltos en el agua subterránea, los denominados constituyentes menores y traza, entre los que se encuentran: aluminio, oro, arsénico cobalto, cobre, mercurio, fierro, plomo, níquel, selenio y flúor, entre otros, que incluso son nocivos para la salud dependiendo de la concentración.

Entre las sustancias disueltas poco ionizadas o en *estado coloidal*, son importantes los ácidos y aniones derivados del sílice ( $\text{SiO}_2$ ). El resto de los iones y sustancias disueltas se encuentran, por lo general, en cantidades notablemente más pequeñas y se denominan *iones menores*. Habitualmente constituyen menos del 1% del contenido iónico total. Los elementos traza, aunque presentes, representan cantidades difícilmente cuantificables por medios químicos usuales.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

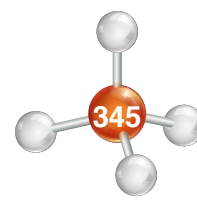
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





Son iones menores el  $\text{NO}_2^-$ , el  $\text{F}^-$ , el  $\text{NH}_4^+$  y el  $\text{Sr}^{2+}$ , que suelen estar en concentraciones entre 0.01 y 10 ppm.

Los **iones metálicos** derivados del As, Sb, Cr, Pb, Cu, Zn, Ba, V, Hg, U, etc., ocasionalmente están en cantidades medibles. En general son elementos traza. El resto de posibles iones están casi siempre en cantidades menores que 0.0001 ppm.

Aunque los iones menores y los elementos traza no suelen determinarse en análisis convencionales, salvo circunstancias especiales, dejan de generar interés; actualmente se dedica a ellos especial atención en ciertas investigaciones ligadas a las sustancias disueltas en el agua que impactan a la salud pública.

El agua subterránea llamada **dulce** contiene de 1,000 a 2,000 ppm de sustancias disueltas; si el contenido es mayor, hasta 5,000 ppm, se llama **agua salobre** y hasta 40,000 ppm agua salada. No es raro encontrar agua que supere las 40,000 ppm de sustancias disueltas llegando hasta las 300,000 ppm. A esta agua se le denomina **salmuera** y está asociada a depósitos salinos, a yacimientos petrolíferos o a agua muy antigua situada a gran profundidad.

### 15.3.4 Análisis químico

El mejor modo de expresar la fracción iónica disuelta en el agua es mediante un análisis químico realizado en laboratorios certificados. Si éste es completo, la primera comprobación es el balance de aniones y cationes. Errores mayores que el 20 ó 30% indican errores en el análisis o que falta determinar algún componente importante.

### 15.3.5 Representación gráfica de las características químicas y su utilidad

El manejo y estudio de análisis químicos puede simplificarse con el empleo de gráficos y diagramas, en especial cuando se trata de hacer comparaciones entre varios análisis de agua de un mismo lugar en épocas diferentes o de diferentes lugares. Estas gráficas y diagramas pueden representar variaciones temporales, espaciales o bien resaltar relaciones entre los iones de una misma muestra. Las representaciones que tienen por objeto resaltar la composición iónica de un agua para permitir compararla con otras aguas son los diagramas en sus diferentes variantes. Son ejemplos los diagramas de Piper, Schoeller, Stiff, Durov, etc.

### 15.3.6 Diagramas triangulares

Los diagramas triangulares se utilizan para representar la proporción de tres componentes en la composición de un conjunto o de una sustancia. La suma de los tres componentes debe representar el 100% de la composición considerada.

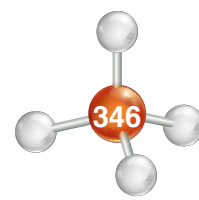
En hidroquímica se utiliza un triángulo para los cationes principales y otro para los aniones. Considere el ejemplo de situar un punto en un triángulo  $\text{Ca}^{2+} / \text{Mg}^{2+} / (\text{Na}^+ \text{K}^+)$ . Un vértice representa el 100% de ese componente. Los puntos que contengan 0% de ese componente estarán en el lado opuesto al vértice correspondiente. El vértice  $\text{Ca}^{2+}$  representa 100% de  $\text{Ca}^{2+}$ , mientras que todos los puntos del lado opuesto a ese vértice suponen 0% de  $\text{Ca}^{2+}$ :

Ejemplo:

Suponga un agua con la siguiente composición de cationes:

$$\text{Ca}^{2+} = 82 \text{ meq/L}; \text{Na}^+ + \text{K}^+ = 104 \text{ meq/L}; \text{Mg}^{2+} = 49 \text{ meq/L}$$

$$\text{Suma de cationes} = 235 \text{ meq/L}; \text{Porcentaje de } \text{Ca}^{2+}: \frac{235}{82} = \frac{100}{x}; X = 34.9\%$$





Mediante cálculos análogos se obtiene que:

$$\text{Na}^+ + \text{K}^+ = 44.3 \% \text{ y } \text{Mg}^{2+} = 20.8\%$$

El punto correspondiente sería el marcado en la Figura 15.1:

El diagrama de Piper (Figura 15.2), está formado por dos triángulos con un rombo que recoge la información de ambos triángulos:

En uno de los triángulos se representan los cationes y en el otro los aniones principales. El paso desde ambos triángulos hasta el rombo es inmediato y muy simple, como se indica en la Figura 15.2. Por tanto, cada análisis queda representado por tres puntos (los dos triángulos y el rombo).

En la Figura 15.2 está representado el  $\text{SO}_4^{2-}$  análisis de una muestra de agua con la siguiente composición:

$$\text{Ca}^{2+} = 60\%; \text{Mg}^{2+} = 30\%; \text{Na}^+ + \text{K}^+ = 10\%,$$

$$\text{HCO}_3^- = 70\%; \text{SO}_4^{2-} = 20\%; \text{Cl}^- = 10\%$$

Lógicamente, los datos de partida deben ser meq/L de cada ion. Es preciso calcular los porcentajes de un modo similar al del ejemplo anterior, considerando separadamente:

$$\Sigma \text{ cationes} = 100 \text{ (para el triángulo izquierdo)}$$

$$\Sigma \text{ aniones} = 100 \text{ (para el triángulo derecho)}$$

## 15.4 Caso de estudio

Los siguientes son los resultados del estudio hidrogeológico realizado en la localidad El Palmar, municipio de Papantla, Ver., cuyo enfoque particular está relacionado con la aplicación hidrogeoquímica.

### 15.4.1 Recopilación y análisis de la información

Se recopiló, depuró y analizó información relativa a estudios hidrológicos, hidrogeológicos y geofísicos del área de estudio que contemplan geología superficial, geología del subsuelo, estratigrafía, tectónica, climatología, censos de captaciones de agua subterránea, piezometría, hidrometría subterránea, calidad y balance de agua subterránea. Las fuentes de recopilación fueron: Servicio Geológico Mexicano (SGM), Comisión Nacional de Agua (CONAGUA) y tesis profesionales de la UNAM que sirvieron para formar la base de datos del proyecto.

### 15.4.2 Verificación geológica

Con los datos recopilados y analizados fue confeccionado un mapa geológico base, en el cual se identificaron puntos estratégicos para realizar la verificación geológica y se diseñaron los recorridos geológicos.

De acuerdo con el estudio geológico de campo, en el entorno de la comunidad El Palmar, Veracruz, existe un conjunto de lomeríos cubiertos de vegetación, cuyas litologías corresponden

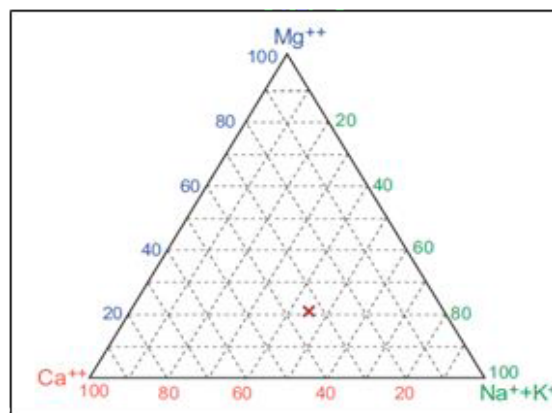


Figura 15.1. Diagrama triangular.

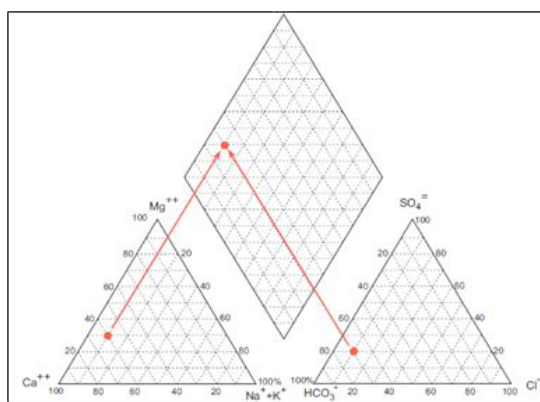


Figura 15.2. Diagrama de Piper.





a depósitos granulares Cenozoicos de la Formación Tuxpan en su miembro inferior, la que se encuentra cubierta en las zonas bajas (en ríos y arroyos) por depósitos fluvio-deltaicos del Cuaternario.

En la Figura 15.3 observamos que afloran sólo dos unidades; la de mayor extensión es la Formación Tuxpan (ToAr-Lm) y el Aluvión (Qhoal) que se ubica en las terrazas, y la llanura de inundación del citado río.

En el área de estudio, la Formación Tuxpan está compuesta de areniscas de grano medio a fino, lentes de conglomerados de calizas empacadas por arcilla fuertemente cementados por carbonato de calcio, areniscas calcáreas y lutitas. Esta formación se presenta emplazada casi horizontalmente con una vergencia de  $6^\circ$  hacia la línea de costa cuya única deformación corresponde con la carga litostática. Contiene también horizontes de tobas color verde, muy alteradas por descomposición química, donde los feldespatos se han transformado en caolín.

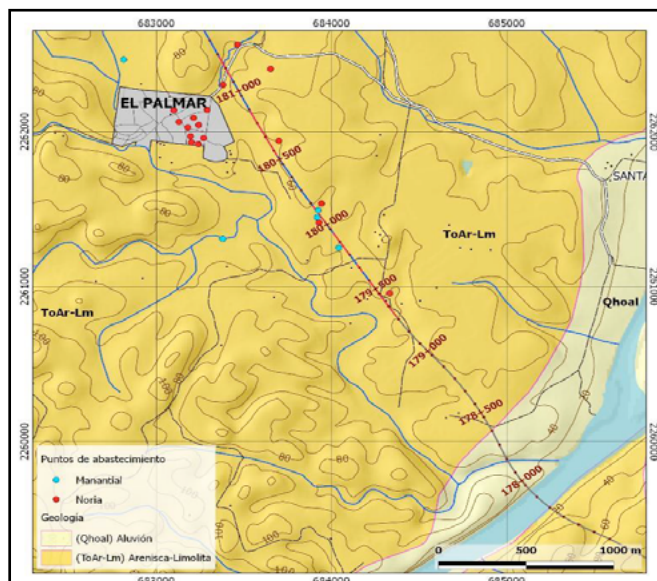


Figura 15.3. Mapa Geológico del área de estudio, donde se ubica a la Comunidad El Palmar en el sector noroeste y al Río Tecolutla en el sector sureste.

Una particularidad de la Formación Tuxpan es la presencia de estratos compuestos de bioclastos (fragmentos de gasterópodos y pelecípodos) de 10 a 30 cm de espesor empacados y cementados fuertemente en sedimentos arcillo-arenosos y carbonatados, lo cual representa antiguas líneas de costa ubicadas hoy en el continente. En el área de estudio la Formación Tuxpan sobreyace en forma concordante a la Formación Escolín y en forma discordante a la Formación Coatzintla.

### 15.4.3 Censo de captaciones

Durante los reconocimientos hidrogeológicos no se encontraron pozos, lo cual indica que la comunidad El Palmar se abastece exclusivamente de norias (pozos excavados a poca profundidad) de los que extrae agua en forma manual, así como también de un par de manantiales de bajo caudal, (Figura 15.4).

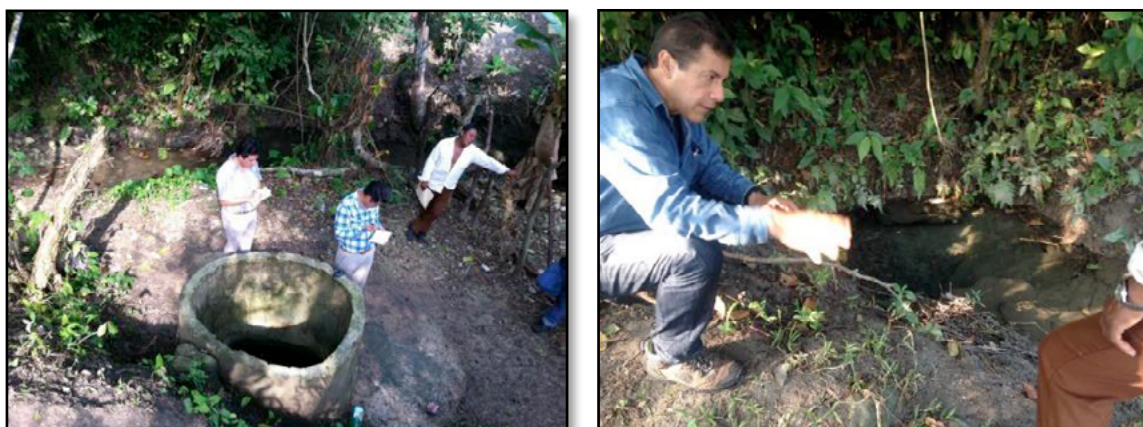


Figura 15.4. Censo de captaciones en los límites del poblado Congregación El Palmar.





En total fueron censadas catorce norias y dos manantiales de los cuales sólo dos cuentan con infraestructura para la extracción (equipo rudimentario de bombeo de las norias de las escuelas primaria y secundaria de El Palmar).

La profundidad de excavación oscila entre 2 y 10 metros con diámetros de 1 metro en promedio. La profundidad promedio de excavación es de 7 metros, siendo la más profunda la que se encuentra en el centro del poblado.

Durante la época de lluvias las norias presentan tirantes de agua de varios metros entre el nivel estático y la profundidad total de la obra, pero en época de estiaje, por sí solo, el nivel desciende, incluso hasta ver seca la captación.

Con respecto a los manantiales afloran, generalmente, en la ladera de los arroyos cuando se presenta también aflorando el conglomerado y son utilizados por pobladores para su consumo y servicios. Sus caudales son en extremo reducidos quizá de un cuarto a medio litro por segundo en promedio, pero tienen la cualidad de fluir independientemente de la época del año; dicha permanencia los hace candidatos a estudios más detallados de hidrología superficial con fines de abastecimiento.

Los resultados del censo de captaciones se presentan en la Tabla 15.1.

#### 15.4.4 Sistema acuífero

De acuerdo con la litología y la posición del nivel del agua se estableció la existencia, en el área de estudio, un acuífero local del tipo semiconfinado a confinado emplazado en la Formación Tuxpan. En ésta, la parte permeable corresponde con los depósitos arenosos del miembro inferior siempre que tengan continuidad hidráulica y espesores que garanticen almacenamiento de agua. Por estas cualidades y dado que se registran altos volúmenes de lluvia en el área, prácticamente todos escurren o se evapotranspiran en superficie debido a la baja capacidad de infiltración y almacenamiento de los materiales de dicha Formación. Los volúmenes que sí llegan a almacenarse son muy limitados para la extracción de caudales en forma continua. Desafortunadamente, el adelgazamiento y acuñamiento lateral de la unidad permeable es generalizado, tanto que algunas captaciones de agua subterránea (norias) son recargadas más eficientemente que otras.

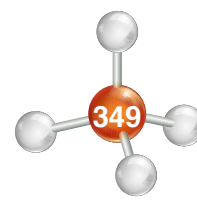
#### 15.4.5 Profundidad y elevación del nivel estático

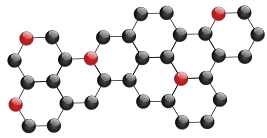
Un factor muy importante en la zona estudiada es la ocurrencia del agua subterránea en una topografía formada por lomeríos de entre 30 y 80 metros de altura, disectados por una serie de arroyos estrechos que, en algunos casos, presentan manantialismo.

En promedio, la profundidad al nivel estático es de 5 metros, dependiendo de la época en la que se mida.

En cuanto a la elevación del nivel estático, después de realizar los ajustes entre las mediciones del nivel del agua y los brocales de las norias, fue realizada la configuración local de elevación: la carga hidráulica máxima es de 77 msnm en la porción nororiental de la comunidad, cuyo flujo se manifiesta al surponiente con pérdidas de carga hasta los 36 msnm.

La dirección de flujo subterráneo es sensiblemente paralela a los escurrimientos superficiales y es posible que aflore en los arroyos siempre que en nivel de saturación interseque también los depósitos conglomeráticos (Figuras 15.5 y 15.6).

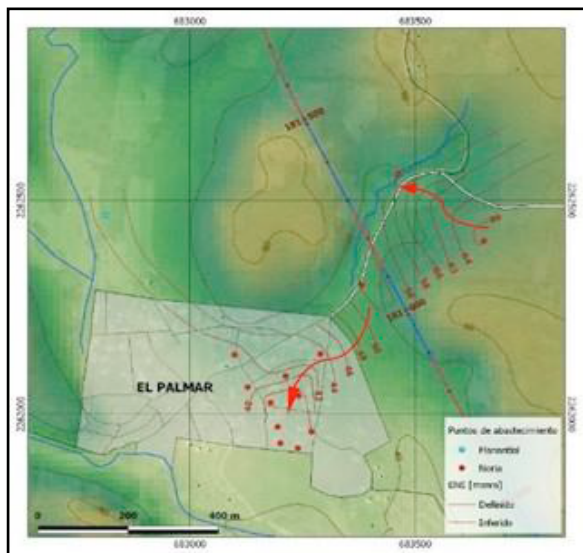




N°	PROPIETARIO	DIRECCIÓN	CAPTACIÓN	USO	utm-x	utm-y	z (msnm)	Bocal (m)	PNE (m)	FECHA	CONSTRUCCIÓN	Díámetro (m)	Prof. Total (m)	Tipo Bomba	Marca/modelo	OBSERVACIONES	
1	Pozo comunitario	Frente Diconsa Y Auditorio	Noria	Consumo humano/Doméstico	683099	2262139	59	0.7	10.55	03/03/2016	SD	SD	SD	NA	NA	No equipado/ muestra hanna Palmart	
2	SD	Esc. Prim. Rural Justo Sierra	Noria	Consumo humano/Doméstico	683128	2262063	37	0.81	5.76	03/03/2016	SD	1.52	9.16	Externa	WGF MSJLJ P15 Y P152	Mala construcción, impermeable en la totalidad del agujero/ Muestra hanna P15 Y P152	
3	Loreto Xochihua	SD	Noria	Consumo humano/Doméstico	683380	2262302	54	0.76	3.06	03/03/2016	SD	1.5	5	NA	NA	No equipado / Muestra hanna	
4	Loreto Xochihua	SD	Noria	Consumo humano/Doméstico	683651	2262405	50	0.86	2.99	03/03/2016	20/06/1978	1.68	5.47	NA	NA	No la usan / Muestra hanna	
5	Comunitario	"Noria 4"	Noria	Consumo humano/Doméstico	683462	2262561	45	0.825	1.2	03/03/2016	16/06/1969	1.42	3.15	NA	NA	No equipado/ muestra hanna Noria4/ junto a escurrimiento superficial a 4 m de distancia	
6	Valentina Olmedo	SD	Noria	Consumo humano/Doméstico	683200	2261932	38	0.6	3.87	04/03/2016	SD	1.11	5.37	NA	NA	Muestra hanna Valentina40	
7	Nestora Olarte	SD	Noria	Consumo humano/Doméstico	683194	2261970	34	0.74	5.48	04/03/2016	SD	1.29	8.33	Externa	SD	Muestra hanna Nestora0	
8	SD	Esc. Sec. Rafael Ramirez	Noria	Consumo humano/Doméstico	683179	2262027	-157?	0.77	7.7	04/03/2016	SD	2.52	8.52	Externa	Bonasa 10/60N SecRram	Bomba de 0.77 hp / muestra hanna	
9	SD	Capilla	Noria	Consumo humano/Doméstico	683239	2261920	29	0.76	3.67	04/03/2016	SD	1.23	5.05	NA	NA	Muestra hanna Capilla	
10	SD	Junto a Capilla	Noria	Consumo humano/Doméstico	683269	2261959	34	0.71	5.01	04/03/2016	SD	1.265	6.42	NA	NA	Muestra hanna Icapilla	
11	Lucio Tiburcio Valencia	SD	Noria	Consumo humano/Doméstico	683212	2262089	41	0.67	8.41	04/03/2016	01/05/2013	1.5	9.21	NA	NA	Al fondo de la perforación se aprecia el Conglomerado / Muestra hanna LucioV	
12	Pedro Reyes	SD	Noria	Consumo humano/Doméstico	683289	2262141	37	0.7	7.78	04/03/2016	01/05/2011	0.99	8.36	NA	NA	Al fondo de la perforación se aprecia el Conglomerado / Muestra hanna PedroR	
13	Dionisio Reyes	SD	Noria	Consumo humano/Doméstico	683241	2262043	48	0.79	10.14	04/03/2016	SD	1.2	11.94	NA	NA	No equipado / muestra hanna Dionisior	
14	SD	"Manantial"	Manantial	Consumo humano/Doméstico	683378	2261309	21	NA	NA	04/03/2016	NA	NA	NA	NA	NA	Hanna sin memoria, datos en fotografía	
15	SD	"M2" noria junto a manantial	Noria	Consumo humano/Doméstico	682813	2262465	33	NA	1	04/03/2016	NA	1.1	2.29	NA	NA	NA	Noria junto a escurrimiento superficial, se identifica como manantial M2 ya que a pocos metros se localiza el manantial/ muestra hanna en fotografía

SD - Sin dato  
NA - No aplica

Tabla 15.1. Censo general de captaciones de agua subterránea de la localidad El Palmar.



Figuras 15.5. Mapa de elevación del nivel estático en las captaciones censadas.



Figura 15.6. Elevación del nivel estático en las captaciones censadas.

#### 15.4.6 Pruebas de bombeo

Con la finalidad de evaluar la capacidad de las unidades litológicas en cuanto a la transmisión de flujos de agua y de evaluar también la posibilidad de bombear en forma continua, fueron realizadas un par de pruebas de bombeo en la localidad Congregación El Palmar. Las norias elegidas fueron la noria escuela primaria y la noria 4. Fue utilizada una bomba sumergible de  $\frac{3}{4}$  de caballo, un motor a gasolina y los aditamentos necesarios para su ejecución; esta bomba sirvió, incluso, para muestreo de agua subterránea. Los resultados más sobresalientes muestran, prácticamente, un desalojo del volumen almacenado de las norias en 2 horas y media con un caudal de 0.9 lps.

Los resultados no fueron interpretables, debido a que no se observó ajuste a alguna curva teórica de descenso vs tiempo. En resumen, la prueba consistió prácticamente en drenar lo que sería un tanque (drenado del almacenamiento del pozo), sin que participaran volúmenes procedentes del acuífero. La recuperación de niveles fue sumamente lenta. Tardó 36 hrs., aproximadamente.

#### 15.4.7 Exploración geofísica

Para caracterizar la distribución de la resistividad en el subsuelo y correlacionarla con los materiales geológicos presentes, se realizaron 14 sondeos geofísicos con la técnica del *transitorio electromagnético* (TEM). Esta técnica consiste en colocar una bobina o espira de forma cuadrangular con dimensiones de 50 x 50 m utilizando el arreglo conocido como *bobina simple*, para alcanzar una profundidad de investigación de, al menos, 100 m.

El área fue fraccionada en 4 secciones geoeléctricas, a partir de la interpolación de los modelos unidimensionales generados para cada sitio medido, donde es posible distinguir tres horizontes característicos con distintos valores de resistividad: Unidad U1 relacionada con el miembro conglomerático de la Formación Tuxpan con valores de 50 a 200 Ohm-m, la unidad U2 relacionada con el miembro areno-arcilloso de la formación Tuxpan con 20 a 30 Ohm-m y la unidad U3 relacionada a la Formación Escolín (arcillosa) con valores menores de 5 Ohm-m.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22



Para fines prácticos, de las 4 secciones levantadas en campo, se presenta en este texto sólo la número 4 por ser la que resultó con mejores posibilidades acuíferas en la Unidad Geoeléctrica 2, a unos 50 metros de profundidad con resistividades de 10 a 14 ohm-m (Figura 15.7).

Estas resistividades son un indicador de la presencia de los iones disueltos en el agua subterránea y sirven para identificar la ocurrencia del acuífero.

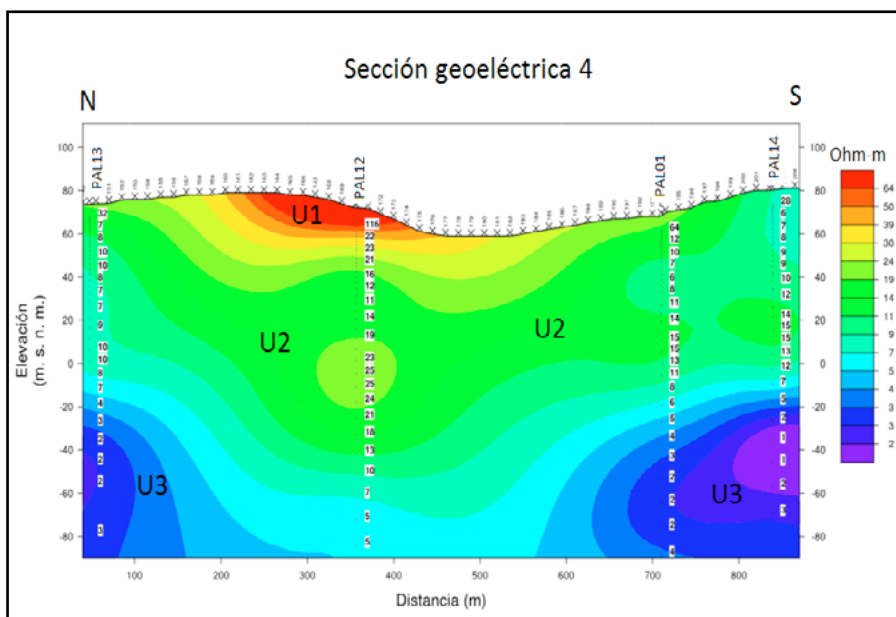


Figura. 15.7. Sección geoeléctrica 4.

### 15.4.8 Calidad del agua subterránea

Otra actividad particular de este proyecto fue la recolección de muestras de agua subterránea para su análisis en laboratorio. Los resultados indican que la mayoría de los parámetros se encuentran dentro de la Norma de potabilidad NOM-127, salvo el caso de algunas captaciones que sobrepasaron valores de coliformes fecales, coliformes totales, sulfatos, fierro, dureza y nitrógeno orgánico.

A continuación, se presenta una breve descripción del comportamiento espacial de algunos parámetros (Tabla 15.2).

La siguiente representación del comportamiento espacial de los resultados de análisis químicos de STD (Sólidos Totales Disueltos): en general, el agua muestreada presenta buena calidad con respecto a este parámetro, salvo la muestra 1, correspondiente a la noria del centro de la comunidad, que resultó con 2240 mg/l. Según la configuración de isocóncas, existe un aumento hacia la porción suroriente, coincidente con el flujo de descarga natural del agua subterránea, incluso con las concentraciones del ion Sulfato (Figura 15.8).

### 15.4.9 Coliformes fecales y coliformes totales

Prácticamente todos los análisis realizados resultaron con valores por encima de los reportados en la norma 127, por lo que no se garantiza la potabilidad de toda el agua que se encuentre en el subsuelo de la zona de estudio y sus alrededores. Esto significa que las actividades humanas han impactado desde hace tiempo la calidad natural del agua subterránea y que existe una fuente permanente que aumenta la concentración de este parámetro.





PARÁMETRO	UNIDAD	NOM-127-SSA	M1	M2(1)	M2(2)	M3	M4	M5
Color real / Color aparente	Upt/Co	20	15/15	10/10	8/-	10/-	30/-	10/-
Olor	-	inoloro	inoloro	inoloro	inoloro	inoloro	8	inoloro
Turbiedad	NTU	5	< 5	< 5	0.35	0.3	0.6	0.45
Sabor	-	agradable	-	-	agradable	agradable	agradable	agradable
DBO5	mg/l	-	9.12	7.09	3	3	5	6
DQO	mg/l	-	149.89	117.1	-	-	-	-
Sólidos Totales	mg/l	1000	<b>2240</b>	515	438	400	438	390
Cloruros	mg/l	250	111.67	28.04	27.9	23.5	33.8	17.6
Fluoruros	mg/l	1.5	0.9	0.49	-	-	-	-
Sulfatos	mg/l	400	<b>1933</b>	<b>1735.45</b>	37.8	9.2	28.1	16.1
Aluminio	mg/l	0.2	-	-	0.00906	ND	0.01055	ND
Arsénico	mg/l	0.05	< 0.1	< 0.01	0.00906	0.00812	ND	0.00794
Cadmio	mg/l	0.005	-	-	ND	ND	ND	ND
Cobre	mg/l	2	< 0.05	< 0.05	0.01013	0.00812	0.00832	0.00705
Cromo Total	mg/l	0.05	< 0.05	< 0.05	-	-	-	-
Fierro	mg/l	0.3	0.132	0.145	0.06317	0.04356	0.06164	<b>0.6951</b>
Magnesio	mg/l	-	92.6	15.9	7.4	7.3	9.5	7
Manganeso	mg/l	0.15	< 0.1	< 0.1	0.01026	0.01472	0.03156	0.0437
Mercurio	mg/l	0.001	< 0.005	< 0.005	ND	ND	ND	ND
Plomo	mg/l	0.025	< 0.2	< 0.02	ND	ND	ND	ND
Sodio	mg/l	200	157	33.9	34.785	24.615	27.368	18.762
Zinc	mg/l	5	0.062	0.073	0.005	0.00713	0.00332	0.00358
Bario	mg/l	0.7	-	-	0.21937	0.11105	0.0782	0.11604
Cadmio	mg/l	0.005	< 0.01	< 0.01	ND	ND	ND	ND
Cianuros	mg/l	0.07	-	-	ND	0.0006	0.001	0.0006
SAAM	mg/l	0.5	< 0.5	< 0.5	0.01	0.01	0.01	0.01
Boro	mg/l	-	0.141	< 0.1	-	-	-	-
Potasio	mg/l	-	17.02	1.5	-	-	-	-
Calcio	mg/l	-	493	135	96.9	78.1	77.9	74.6
Acidez	mg/l	-	11.4	13.78	-	-	-	-
Sílice	mg/l	-	41.5	28.95	-	-	-	-
Nitrógeno de nitritos	mg/l	0.05	-	-	0.0034	0.0014	0.0015	0.0007
Nitrógenos de nitratos	mg/l	10	2.46	0.41	0.2624	0.0077	0.0173	0.0226
Nitrógeno amoniacal	mg/l	0.5	< 1	< 1	0.0622	0.1038	0.0525	0.1425
Nitrógeno orgánico	mg/l	0.1	<b>&lt; 1</b>	<b>&lt; 1</b>	<b>0.2</b>	<b>0.3581</b>	<b>0.5033</b>	<b>0.4024</b>
Dureza total	mg/l CaCO <sub>3</sub>	500	<b>1293.6</b>	335.16	364	315	323	313
Dureza de calcio	mg/l CaCO <sub>3</sub>	-	891.8	292.04	-	-	-	-
Dureza de magnesio	mg/l CaCO <sub>3</sub>	-	401.8	43.12	-	-	-	-
Alcalinidad total	mg/l CaCO <sub>3</sub>	-	277.2	321.3	345	312	322	299
Bicarbonatos	mg/l CaCO <sub>3</sub>	-	277.2	321.3	345	312	322	299
Carbonatos	mg/l CaCO <sub>3</sub>	-	0	0	0	0	0	0
Hidróxidos	mg/l CaCO <sub>3</sub>	-	0	0	0	0	0	0
Coliformes fecales	N MP/100 ml	ND	<b>70</b>	<b>920</b>	<b>&gt; 8</b>	<b>&gt; 8</b>	<b>&gt; 8</b>	<b>&gt; 8</b>
Coliformes totales	N MP/100 ml	2	<b>70</b>	<b>1600</b>	<b>&gt; 8</b>	<b>&gt; 8</b>	<b>&gt; 8</b>	<b>&gt; 8</b>

Tabla 15.2. Resultados analíticos de agua subterránea de acuerdo con el laboratorio ABC

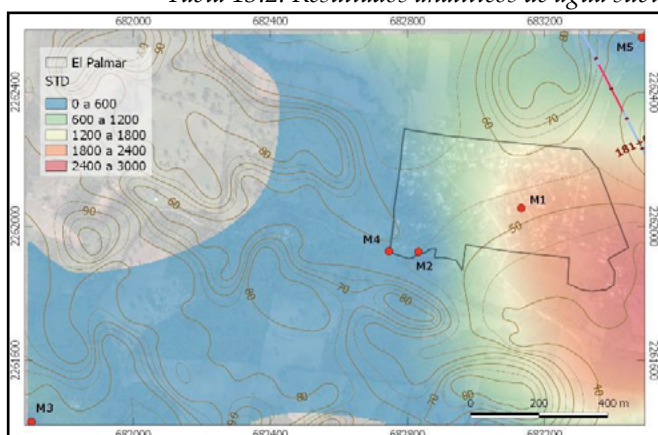


Figura 15.8. Isovalores de sólidos totales disueltos en el agua subterránea.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





### 15.4.10 Representación de la concentración iónica mediante diagramas

Los resultados de los análisis químicos practicados a 5 norias fueron capturados y analizados con el apoyo del software especializado AquaChem Versión 3.7 de Waterloo Hydrogeologic. Indican que las familias de agua corresponden a cálcico-sulfatadas para las norias M-1 y M-2, cuyos iones predominantes, calcio y sulfato, han sido tomados por el agua subterránea de la alteración de feldespatos y del cementante de depósitos areno-limosos de la Formación Tuxpan, así como de procesos evaporíticos sulfatados procedentes de minerales con yesos o anhidrita. Un análisis análogo para las norias M-3, M-4 y M-5, que resultaron cálcico-bicarbonatadas, indica que la firma iónica corresponde con agua que ha estado en contacto con rocas areno-limosas de la Formación Tuxpan cuyos iones predominantes, calcio y bicarbonato, han sido tomados de los feldespatos y de las areniscas y el ion bicarbonato es producto de la disolución de los depósitos de conglomerados cuyos clastos son de roca caliza, así como de su cementante carbonatado.

La Figura 15.9 ofrece el archivo de salida del programa AquaChem en el que se muestran los resultados en los diagramas de Piper, Schoeller, diagrama radial y diagrama de Durov, para marzo de 2016, en los que pueden apreciarse las concentraciones iónicas en el agua subterránea analizada, en diferentes formatos y a diferentes escalas.

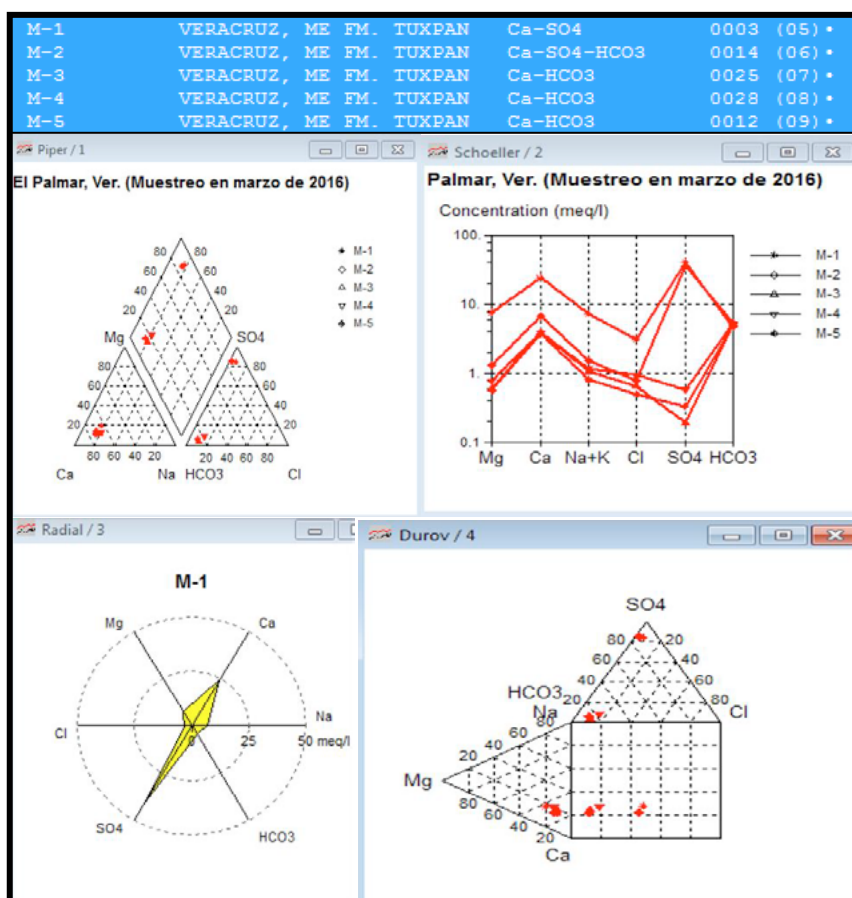


Figura 15.9. Representación de la concentración iónica mediante diagramas.

Comparativamente, se cuenta con información obtenida en estudios anteriores en la Cuenca del Río Tecolutla, cuyos resultados (1982), indican que la familia de aguas es inicialmente cálcica-bicarbonatada, como se muestra en el diagrama hidrogeoquímico de Piper (Figura 15.10). Dicha comparación resalta que la calidad en la localidad El Palmar y sus alrededores se ha mantenido desde hace 34 años en la parte cálcica-bicarbonatada, aunque en la antigüedad no se reportó la



parte sulfatada como en la actualidad. Ha habido, entonces, una clara evolución debida a la concentración del ion sulfato en las formaciones geológicas permeables del área de estudio.

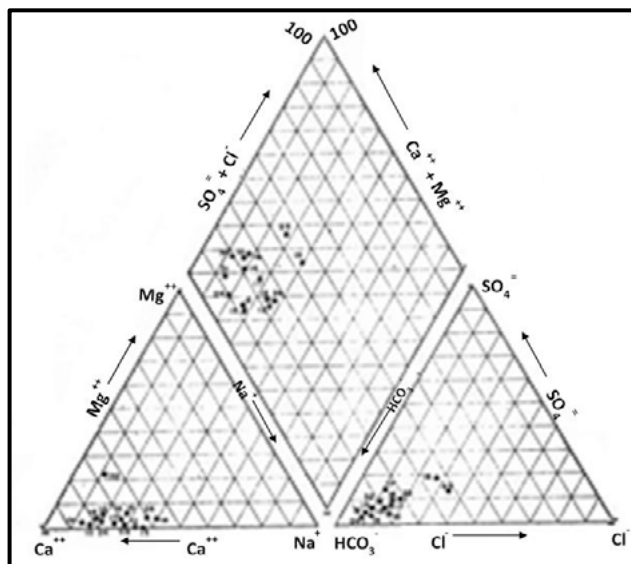


Figura 15.10. Diagrama Piper (SARH; 1981).

## 15.5 Presentación de resultados

En las norias y manantiales medidos, la temperatura promedio del agua es de 23.5° C. Sólo la de la noria 2 presentó una temperatura de 26°C. El agua de las norias representa la temperatura del medio ambiente: se debe tener cuidado con esta medición y poner atención en la temperatura reportada del manantial medido al sur de la comunidad con 22° C puesto que representa agua fresca de descarga del acuífero, considerada de recién ingreso.

El agua subterránea presenta un promedio de 7.3 en el valor del pH, lo que significa que es agua ligeramente incrustante. Este dato está influenciado por la presencia de los iones carbonato y calcio, los cuales designan a una familia del agua subterránea como cálcica - bicarbonatada.

Respecto al parámetro de concentración de sólidos totales disueltos, el agua subterránea presenta buena calidad: 550 ppm en promedio, salvo el caso de la noria 2 que resultó con un valor mayor a 1800 ppm. Esta cantidad está relacionada con la cantidad de iones disueltos en el agua y directamente con el tiempo que el agua ha tenido contacto con la formación. Los valores mayores de 1000 ppm representan peligro para la salud, conforme a la normatividad mexicana.

La concentración de oxígeno disuelto presenta un promedio de 3.9, con tendencia a aumentar desde el noroeste al centro, así como desde el noreste. Este parámetro está relacionado con la capacidad del agua subterránea para oxidar otros elementos dentro del sistema, es decir, de su capacidad de solubilidad. Puesto que la medición realizada considera agua prácticamente estancada, este valor es modificado si se trata de agua superficial en donde el análisis debe tomar en cuenta el fenómeno de la fotosíntesis y el consumo de oxígeno por los organismos presentes.

Los resultados obtenidos en el laboratorio evidencian que la mayoría de los parámetros se encuentran dentro de la Norma 127, salvo el caso de algunas captaciones que sobrepasaron valores de coliformes fecales, coliformes totales, sulfatos, fierro, dureza y nitrógeno orgánico.

El agua dulce presenta concentraciones de sulfatos de hasta de 150 mg/l, mientras que en agua salina asociada al calcio puede alcanzar hasta 5,000 mg/l. En la zona de estudio, la concentración promedio es de 23 mg/l, pero las muestras de M1 y M2 resultaron con alta concentración: 1933 y 1735 mg/l, respectivamente. Estas captaciones están localizadas al nororiente de la localidad,



paralelas a la dirección de flujo subterráneo en la zona de menor carga hidráulica, con 35 msnm en promedio.

## 15.6 Conclusiones

Los pobladores de la comunidad El Palmar, municipio de Papantla Veracruz, presentan dificultades cada vez más severas para resolver los problemas de abasto de agua, incluso para uso potable. Dicha comunidad se encuentra asentada en el área geológicamente denominada Formación Tuxpan del Paleógeno-Neógeno, compuesta por depósitos granulares heterogéneos y anisótropos fuertemente empacados y cementados por carbonatos, los cuales forman horizontes de textura variable (desde arcillosos hasta conglomeráticos) que se interdigitan e interestratifican e incluyen estructuras de relleno, como canales y lentes.

La ocurrencia de agua subterránea se ve seriamente afectada por la baja porosidad y permeabilidad de los materiales litológicos del área.

No es posible denominar acuífero regional a los depósitos del Paleógeno-Neógeno de la Formación Tuxpan, más bien, dentro de dicha formación se encuentran horizontes formados por areniscas de grano medio a fino que, cuando se encuentran interconectados y bien recargados pueden formar un acuífero local semiconfinado de muy bajo rendimiento.

Debido a la limitada capacidad para transmitir y almacenar agua subterránea, las captaciones censadas (norias y manantiales) no son capaces de sustentar un bombeo continuo ya que se abaten por completo y es necesario esperar de 12 a 72 horas para que restablezcan su nivel. Esto ocurre en época de lluvias; mientras que en la época de estiaje el problema se agudiza debido a la nula recarga de agua subterránea.

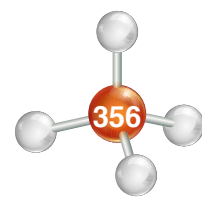
Los manantiales permanentes son de caudal mínimo: de menos de un cuarto a medio litro por segundo. De forma natural, las norias abaten sus niveles en época de estiaje, mientras que en la época de lluvias la mayor parte de los volúmenes escurren debido a la baja capacidad de infiltración y a la limitada capacidad de almacenaje del medio geológico.

La exploración geofísica permitió localizar un sitio con resistividades de entre 10 y 14 ohms-m (Unidad Geoelectrica 2) correlacionable con la unidad arenosa de la Formación Tuxpan miembro inferior, indicativo de formaciones saturadas a una profundidad de entre 40 y 50 m (perfil geoelectrico 4).

Prácticamente todas las obras de captación presentaron contaminación por coliformes fecales, impacto de las actividades humanas en el acuífero.

Sulfatos, nitratos y fierro resultaron fuera de la norma en algunas de las captaciones localizadas al nororiente de la localidad, aproximadamente paralelos a la dirección de flujo subterráneo en la zona de menor carga hidráulica.

Interpretaciones de análisis químicos mediante diagramas de Piper de entre los años de 1982 y 2016, indican que el agua subterránea corresponde con la familia cálcica – bicarbonatada, apareciendo el ion sulfato únicamente en los resultados de 2016. Esto indica que el flujo subterráneo ha estado en contacto con formaciones geológicas que en el pasado correspondían con ambientes evaporíticos.





# Capítulo 16

## La Química y la disolución de carbonatos

Daniel López Aguirre, Gerardo Barón Sánchez, Sergio Berumen Campos

### 16.1 Introducción

En el mundo existe una gran cantidad de yacimientos de rocas carbonatadas. Aproximadamente el 60% de las reservas de petróleo en nuestro planeta se encuentran en yacimientos de este tipo, mismos que contienen, un importante potencial de reservas de gas (*Schlumberger, 2008*).

Estimularlos mediante la inyección de ácido en la matriz puede generar pingües beneficios al obtener mayor volumen de hidrocarburos o en su defecto mantener los gastos de producción.

En este capítulo se destaca la importancia de la química como ciencia aplicada en la resolución de casos prácticos de ingeniería petrolera al obtener la cantidad de ácido necesario para disolver un volumen de rocas carbonatadas con el propósito de extraer una mayor cantidad de hidrocarburos.

Determinar apropiadamente las fracciones minerales de una roca de yacimiento, da la pauta para hacer un traje a la medida para cada caso de campo: precisando las mezclas adecuadas de varios tipos de ácidos, se estará en aptitud de proponer mejores diseños de estimulación de pozos para incrementar el beneficio y reducir la incertidumbre.

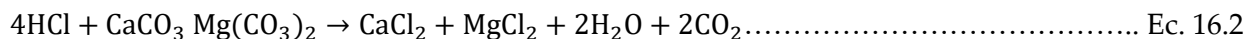
### 16.2 Reacciones estequiométricas de los ácidos con minerales de rocas carbonatadas

#### 16.2.1 Reacción del ácido clorhídrico con calcita y dolomita (carbonatos)

El ácido clorhídrico reacciona con la calcita formando cloruro de calcio soluble en agua y dióxido de carbono gaseoso:



En el caso de la dolomita, el ácido clorhídrico reacciona con los carbonatos, generando cloruros de calcio y magnesio, agua y dióxido de carbono gaseoso:



#### 16.2.2 Reacción del ácido fluorhídrico con sílice (areniscas)

El ácido fluorhídrico reacciona con el óxido de silicio

### Sumario

#### 16.1 Introducción

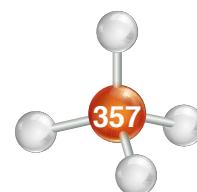
#### 16.2 Reacciones estequiométricas de los ácidos con minerales de rocas carbonatadas

#### 16.3 Caso práctico No. 1. Problema de disolución de rocas carbonatadas

#### 16.4 Estimulación ácida (Acidificación)

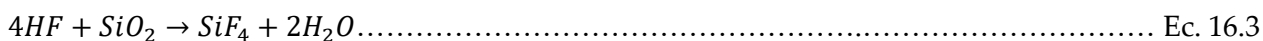
#### 16.5 Caso práctico No. 2. Problema de diseño de acidificación a carbonatos

#### 16.6 Conclusiones





(sílice) produciendo fluoruro de silicio y agua:

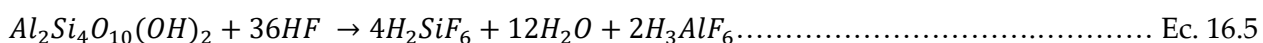


### 16.2.3 Reacción del ácido fluorhídrico con arcillas o feldespatos (lutitas)

La reacción del ácido fluorhídrico con el silicato de sodio genera fluoruros de sodio y silicio y agua:



Mientras que al reaccionar con silicoaluminatos, el ácido fluorhídrico produce los ácidos hexafluorosilícico y hexafluoroalumínico y agua:



El ácido hexafluorosilícico fácilmente intercambia sus hidrógenos ácidos por iones de sodio o potasio, para formar el hexafluorosilicato de sodio:



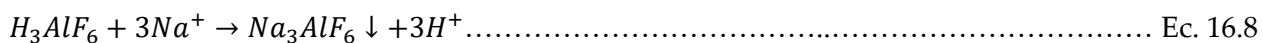
O el hexafluorosilicato de potasio:



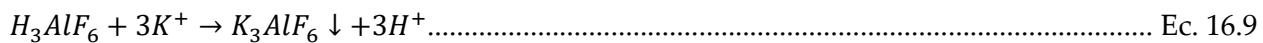
donde:

- \* $Al_2Si_4O_{10}(OH)_2$ - es arcilla
- \* $H_2SiF_6$ - es ácido fluosilícico
- \* $H_3AlF_6$ - es ácido fluoalumínico.

Igualmente, el ácido hexafluoroalumínico intercambia sus hidrógenos ácidos por iones de sodio o potasio, para formar hexafluoroaluminato de sodio:



O hexafluoroaluminato de potasio:



### 16.2.4 Reacción del ácido fluorhídrico con calcita (carbonatos)

La reacción del ácido fluorhídrico con calcita produce fluoruro de calcio (fluorita, sustancia prácticamente insoluble cuyo  $K_{ps}$  es de  $1.7 \times 10^{-10}$ ), agua y dióxido de carbono gaseoso:



### 16.2.5 Reacción del ácido acético con calcita (carbonatos)

Para evitar precipitados insolubles, el HF nunca se usa solo. Se puede emplear, entonces, ácido acético, el cual reacciona con calcita generando acetato de calcio (que sí es hidrosoluble), agua y dióxido de carbono gaseoso:

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

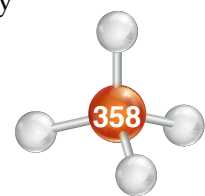
Cap. 18

Cap. 19

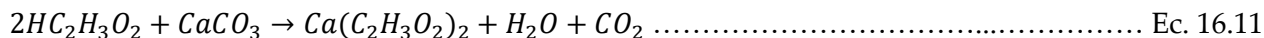
Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22







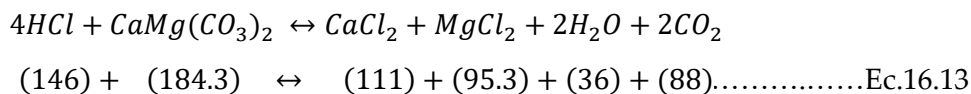
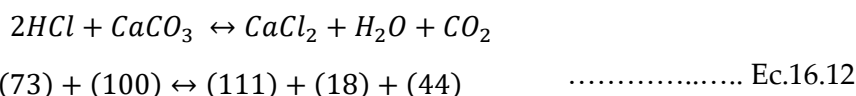
donde:

$HC_2H_3O_2$ , es ácido acético

$Ca(C_2H_3O_2)_2$ , es acetato de calcio

### 16.3 Caso práctico No. 1. Problema de disolución de rocas carbonatadas, utilizando análisis químico (estequiometría)

De las ecuaciones estequiométricas (16.1) y (16.2), relacionadas con la reacción de ácido clorhídrico y rocas con contenido de carbonato de calcio (Calcita,  $CaCO_3$ ) y carbonato de calcio y magnesio (dolomita  $CaMg(CO_3)_2$ ), podemos obtener las sustituciones siguientes:



Los números de los paréntesis en las ecuaciones (16.12) y (16.13), son las masas moleculares aproximados de los compuestos. Es decir, 73 libras de ácido clorhídrico reaccionan con 100 libras de carbonato de calcio para formar 111 libras de cloruro de calcio, 18 libras de agua y 44 libras de gas dióxido de carbono. En la tabla 16.1 se muestran las masas moleculares de otros compuestos y minerales.

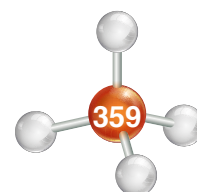
Propiedades de ácidos y carbonatos	
Ácidos inorgánicos	MW [gr/mol]
HCl	36.47
Hf	20.01
Ácidos orgánicos	MW [gr/mol]
Fórmico (HCOOH)	46.03
Acético (CH <sub>3</sub> COOH)	60.05
Minerales y otros	MW [gr/mol]
CaCO <sub>3</sub>	100.09
CaMg(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	184.3
CaCl <sub>2</sub>	110.99
MgCl <sub>2</sub>	95.211
CO <sub>2</sub>	44.01
H <sub>2</sub> O	18.02

Tabla 16.1. Peso molecular de diferentes tipos de ácido y rocas carbonatos.

El poder de disolución de cualquier ácido (expresado como volumen de roca disuelto por unidad de volumen de ácido que reacciona), se puede obtener de la siguiente manera:

Definimos  $\beta$  como la masa de roca disuelta por unidad de masa de ácido que reacciona:

$$\beta = \frac{MW_m * SC_m}{MW_a * SC_a} \dots\dots\dots Ec. 16.14$$





donde,

$MW$  es la masa molecular

$SC$  es el coeficiente estequiométrico

Los subíndices  $m$  y  $a$ , son mineral y ácido respectivamente

Por ejemplo, en la reacción de HCl al 100% con una caliza pura (calcita,  $CaCO_3$ ), aplicando la ecuación (16.14), se tiene que:

$$\beta_{100} = \frac{100.09 * 1}{36.47 * 2} = 1.372 \text{ gramos de } CaCO_3 / \text{gramos de HCl al 100\%}$$

Sin embargo, en operaciones de estimulación reales, la concentración de HCl será siempre menor al 100%, inclusive no mayor al 30%, dada su alta corrosividad que afecta la integridad mecánica de los pozos. Por lo tanto:

$$\beta_y = \beta_{100} * y \dots\dots\dots \text{Ec. 16.15}$$

donde,

$y$  es el porcentaje en masa de ácido en valor absoluto.

Por último, si se define a  $Z$ , como el poder de disolución del ácido, se tiene que:

$$Z = \frac{\rho_\alpha * \beta_y}{\rho_m} \dots\dots\dots \text{Ec. 16.16}$$

donde,

$\rho_\alpha$ , es la densidad del ácido al porcentaje dado

$\rho_m$ , es la densidad del mineral.

Simplificando la ecuación (16.16), se tiene que:

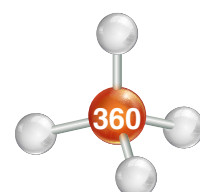
$$Z = \frac{\gamma_y * \beta_y}{\gamma_m} \dots\dots\dots \text{Ec. 16.17}$$

Si se tiene, por ejemplo, en un HCl al 15%, con densidad de 1.073 [gr/cm<sup>3</sup>] y una caliza con densidad relativa de 2.72 [gr/cc], el poder de disolución será:

$$Z = \frac{1.073 * 0.15 * 1.372}{2.72} = 0.082 \text{ [vol. mineral/vol. ácido HCl 15\%]}$$

Este resultado dictamina que son necesarios 12.2 unidades de volumen de HCl (15%) para disolver una unidad de volumen de carbonato de calcio en una roca de 2.72 [gr/cc] de densidad (caliza).

La tabla 16.2, muestra el valor de  $Z$ , obtenido para varios tipos de ácidos, utilizados comúnmente en la industria petrolera:





Poder de disolución de varios tipos de ácido					
Tipo de ácido/Parámetros	Z (Poder de disolución)				
	$\beta_{100}$	5%	10%	15%	20%
<b>Calcita (<math>\text{CaCO}_3</math>, <math>\rho=2.71 \text{ [gr/cm}^3\text{]}</math>)</b>					
Ácido Clorhídrico (HCl)	1.37	0.026	0.053	0.082	0.175
Ácido Fórmico (HCOOH)	1.09	0.02	0.041	0.062	0.129
Ácido Acético ( $\text{CH}_3\text{COOH}$ )	0.83	0.016	0.031	0.047	0.096
<b>Dolomita (<math>\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2</math>, <math>\rho=2.87 \text{ [gr/cm}^3\text{]}</math>)</b>					
Ácido Clorhídrico (HCl)	1.27	0.023	0.046	0.071	0.152
Ácido Fórmico (HCOOH)	1	0.018	0.036	0.054	0.112
Ácido Acético ( $\text{CH}_3\text{COOH}$ )	0.77	0.014	0.027	0.041	0.083

Tabla 16.2. Valores de poder de disolución de varios tipos de ácido.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

## 16.4 Estimulación ácida (acidificación)

### 16.4.1 Acidificación a la matriz de rocas carbonatadas

Una *estimulación ácida* o *acidificación*, se define como la inyección de ácido a la formación, a una presión menor que la de fractura. El objetivo del tratamiento consiste en lograr la penetración radial del ácido en la formación.

La estimulación se efectúa para eliminar los efectos de la reducción de permeabilidad en la vecindad del pozo, disolviendo las partículas que obturan la formación.

Cuando la acidificación se efectúa correctamente, se logran incrementos en la producción sin que aumente la relación agua-gas, la relación gas-aceite o la relación agua-aceite.

Debido a que la superficie que tiene contacto con el ácido es amplia, el tiempo de reacción es muy corto. Por lo tanto, la formación sólo queda tratada varias pulgadas a partir de la pared del pozo.

Uno de los problemas previos en el tratamiento de acidificación a la matriz es conocer con precisión la presión de fractura o esfuerzo mínimo del intervalo que va a ser estimulado.

Como la presión de fractura de la formación cambia al disminuir la presión del yacimiento, frecuentemente es necesario efectuar pruebas de admisión en campo para determinarla. También puede ser precisada de manera dinámica a través del cálculo de propiedades elásticas con registros geofísicos de pozo.

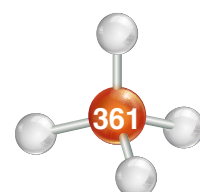
### 16.4.2 Diseño de acidificación de la matriz de rocas carbonatadas

Este procedimiento ácido a la matriz consiste en la especificación del tipo de ácido requerido, de la tasa máxima de inyección de volumen necesario y la presión de inyección máxima que se puede utilizar sin fracturar la formación.

El procedimiento del diseño es el siguiente:

- a) Determinar el gradiente de fractura de los tratamientos de fracturamiento anteriores, obtenida mediante registros o utilizando la siguiente ecuación empírica:

$$G_f = \alpha + (\text{gradiente sobrecarga} - \alpha) (P_R / D) \dots \dots \dots \text{Ec. 16.18}$$





donde:

$\alpha$  = constante ( $0,3 \leq \alpha \leq 0,5$ )

$P_R$  = presión del yacimiento

$D$  = profundidad a la formación de interés

$G_f$  = gradiente de fractura

b) Predecir el gasto máximo en superficie  $Q_{imax}$ , sin fracturar la formación.

Para este efecto se aplica el siguiente planteamiento:

$$Q_{imax} = \frac{4.917 \times 10^{-6} k_{avg} H_n}{\mu \ln\left(\frac{r_e}{r_w}\right)} (G_f D - P_R) [BBL/min] \dots \dots \dots \text{Ec. 16.19}$$

donde:

$k_{avg}$  = promedio de las permeabilidades de las zonas dañada y no dañada, md

$H_n$  = espesor neto del intervalo, [ft]

$\mu$  = viscosidad del ácido en [cp] @ BHT

$r_e$  = radio de drene, [ft]

$r_w$  = radio del pozo, [ft]

$D$  = profundidad vertical del pozo, [ft]

$P_R$  = presión del yacimiento, [psi]

$G_f$  = gradiente de fractura, [psi / ft]

c) Predecir la presión superficial máxima a la que el ácido puede ser inyectado sin fracturar la formación.

$$P_{s-max} \leq (G_f - GRAD_{ACID}) D \dots \dots \dots \text{Ec. 16.20}$$

$GRAD_{ACID}$  = gradiente hidrostático del ácido

En la ecuación (16.20), no se ha incluido las pérdidas por fricción. Por tanto, se considera un factor de seguridad.

d) Determinar el volumen y el tipo de ácido requerido.

Una regla de campo indica que se deben inyectar de 4-16 [bbl/m] de intervalo perforado de un 15 – 28% de ácido HCl en disolución. En nuestro caso se debe tener conocimiento de las fracciones minerales que contiene la roca del intervalo de interés (en la realidad estas se pueden obtener con registros geofísicos); con lo que se podrá diseñar una correcta aproximación mediante el uso de la estequiometría.

### 16.5 Caso práctico No. 2. Problema de diseño de acidificación a carbonatos

Si se consideran los siguientes datos de entrada para una formación de carbonatos:

$K_{avg}$  H = 200 [md-ft]

$D$  = profundidad de formación = 7500 [ft]

Gradiente de sobrecarga = 1.0 [psi / ft]

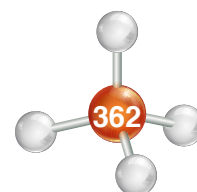
$\mu @ BHT$  = 0.4 [cp]

H = intervalo de perforación = 20 [ft]

$G_{fi}$  = 0.7 [psi / ft] @  $P_{Ri}$  = 3,075 [psi]

$P_R$  = 2000 [psi]

$r_e$  = 660 [ft]





$$r_w = 0.25 \text{ [ft]}$$

$$r_a = 2.5 \text{ [ft]}$$

$$\Phi = 15\%$$

Se pide determinar:

- $Q_{imax}$
- $P_{(s-max)}$
- Volumen de HCl al 15% requerido, considerando 100% calcita
- Volumen de HCl al 15% requerido, considerando 20% calcita y 80% dolomita

Puesto que no se conoce el gradiente de fractura, se determina  $\alpha$  en las condiciones iniciales y se asume que no cambia en las condiciones actuales.

a) Utilizando la ecuación (16.18) @  $P_{Ri} = 3,075$  [psi], con un gradiente de fractura inicial  $G_{fi} = 0.7$  [psi/ft]

$$0.7 = \alpha + (1 - \alpha) \left( \frac{3075}{7500} \right)$$

$$0.7 = \alpha + 0.41 - 0.41 \alpha$$

$$\alpha = \frac{0.7 - 0.41}{0.59} = 0.49 \left[ \frac{\text{psi}}{\text{ft}} \right]$$

Calculando  $G_{fp}$ , para el alfa obtenido:

$$G_{fp} = 0.49 + (1 - .049) \left( \frac{2000}{7500} \right) = 0.63 \left[ \frac{\text{psi}}{\text{ft}} \right]$$

Utilizando la ecuación (16.19), se obtiene  $Q_{imax}$ :

$$Q_{imax} \leq 4.917 \times 10^{-6} \frac{(200)[(0.63)(7500) - 2000]}{(0.4) \ln \left( \frac{660}{0.25} \right)}$$

$$Q_{imax} \leq 0.85 \left[ \frac{\text{bbl}}{\text{min}} \right]$$

En general, se recomienda un margen del 10 %.

$$Q_i \cong (0.85)(0.9) \cong 0.77 \left[ \frac{\text{bbl}}{\text{min}} \right]$$

b) Ahora, se calcula  $P_{s-max}$ , usando la ecuación (16.20):

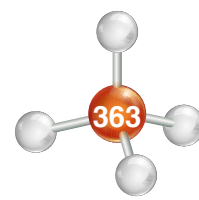
$$P_{s-max} = (G_f - GRAD_{ACID}) D$$

Suponiendo que las condiciones del pozo permiten que se use 15 % de HCl  $\rightarrow \gamma = 1.073$  [adim], @ temperatura media del pozo de 130[°F]

$$GRAD_{ACID} = (1.073) \left( 0.433 \frac{\text{psi}}{\text{ft}} \right) = 0.465 \left[ \frac{\text{psi}}{\text{ft}} \right]$$

$$P_{s-max} \leq (0.63 - 0.465) 7500 = 1240.43 \text{ [psi]}$$

c) Por regla de campo, el volumen de ácido requerido por metro de intervalo perforado es el que se menciona a continuación:







$$V_{ACID} = 4 - 16 \left[ \frac{bbl}{m} \right] \times H$$

Si se asume que el pozo presenta un daño moderado ( $s \approx 2$ ), se requiere el promedio de la regla de campo que es  $8 \left[ \frac{bbl}{m} \right]$ .

$$V_{ACID} \cong 8 \frac{bbl}{m} \times 20 [ft] * \left( 0.3048 \left[ \frac{m}{ft} \right] \right)$$

$$V_{ACID} = 47.62 [bbl] = 48 [bbl]$$

Ahora se mide el volumen de HCl al 15%, utilizando cálculos estequiométricos. El radio al que penetrará el ácido en la matriz porosa es  $r_a = 2.5 [ft]$  y se busca reinstalar la producción del pozo en su estado inicial. En este había una porosidad de 15%, que actualmente se ha reducido en un 5% por precipitación.

Se debe obtener el volumen de porosidad perdido por precipitación de minerales y que se desea recuperar:

$$Vol_{RocaPrecipitada} = \left( \frac{\pi}{4} \right) * d_a^2 * H_n = 0.7854 * 5^2 * 20 * 0.05 = 19.935 [ft]^3$$

Este es el volumen de roca que se debe disolver para incrementar la porosidad.

Aplicando la relación de volúmenes de ácido respecto a la matriz, se obtiene lo siguiente:

$$Vol_{ÁcidoRequerido} = Vol_{RocaPrecipitada} * \left( Relación \frac{Vol. \text{Ácido}}{Unidad Vol. Roca} \right)$$

Sustituyendo valores:

$$Vol_{ÁcidoRequerido} = 19.935 * \left( \frac{1}{0.082} \right) = 243.11 [ft]^3 = 43 [bbl]_{HCl}$$

El último valor, obtenido con el uso de ecuaciones estequiométricas, es del orden del estimado con la regla de campo; el que este valor sea menor, redundará en beneficios económicos al optimizar la cantidad de ácido que en realidad es requerido. Esta aplicación minimiza las reglas de dedo, efectivas sólo en el grado relativo.

Por tanto, el diseño para una formación productora con 100% de calcita es;

Inyectar 43 [bbl], 15 % de HCl @  $Q_i = 0,77 [bbl/min]$ ,  $P_{smax} = 1,050 [psi]$

Se recomienda agregar al tratamiento 1 o 2 % de KCl (inhibidor de arcillas reactivas).

d) Si se considera que la formación productora que se va a disolver consta de la siguiente relación de minerales:

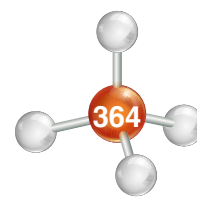
Calcita → 20 %

Dolomita → 80 %

el diseño de acidificación para disolver el mismo volumen de roca precipitada se modifica haciendo las siguientes consideraciones:

$$Vol_{RocaPrecipitada} = \left( \frac{\pi}{4} \right) * d_a^2 * H_n = 0.7854 * 5^2 * 20 * 0.05 = 19.935 [ft]^3$$

El volumen de roca que debemos disolver para incrementar la porosidad es el mismo.





Ahora, la relación de volúmenes de ácido respecto a la matriz es la siguiente:

$$Vol_{\text{ÁcidoRequerido}} = Vol_{\text{RocaPrecipitada}} * Fracción \text{ Roca Caliza} * \left( Relación \frac{Vol. \text{ Ácido}}{Unidad \text{ Vol. Roca Caliza}} \right) + Vol_{\text{RocaPrecipitada}} * Fracción \text{ Roca Dolomía} * \left( Relación \frac{Vol. \text{ Ácido}}{Unidad \text{ Vol. Roca Dolomía}} \right)$$

Sustituyendo valores:

$$Vol_{\text{ÁcidoRequerido}} = 19.935 [ft^3 \text{ de Roca Total}] * 0.2 * \left( \frac{1}{0.082} \left[ \frac{ft^3 \text{ de HCl 15\%}}{ft^3 \text{ de Roca Caliza}} \right] \right) + 19.935 [ft^3 \text{ de Roca Total}] * 0.8 * \left( \frac{1}{0.071} \left[ \frac{ft^3 \text{ de HCl 15\%}}{ft^3 \text{ de Roca Dolomía}} \right] \right) = 48.62 + 224.62 = 273.24 [ft^3] = 49 [bbl]_{HCl}$$

El diseño para una Formación productora con 20% de calcita y 80% dolomita es;

Inyectar 49 [bbl], 15 % de HCl @  $Q_i = 0,77$  [bbl/min],  $P_{smax} = 1,050$  [psi]

Se recomienda agregar al tratamiento 1 o 2 % de KCl (inhibidor de arcillas reactivas).

Es notable que, en la medida en que aumenta la presencia de dolomita en las rocas que se pretende estimular, será requerida una mayor cantidad de ácido clorhídrico para generar canales conductivos.

A pesar de que la regla de campo utilizada por muchos profesionales ofrece una buena aproximación, en sus cálculos no se consideran las variaciones en las fracciones minerales de las rocas productoras. Esta inconsistencia se resuelve mediante la aplicación de esta metodología.

El análisis estequiométrico, realizado para el caso descrito, puede ser extensivo a rocas siliciclásticas y/o arcillas con los ácidos correspondientes.

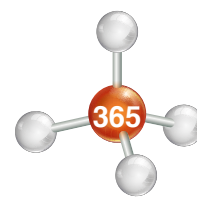
En pozos de alta temperatura o en pozos con daños mayores a 8, se debe utilizar un excedente en el volumen de ácido. En zonas de alta permeabilidad o formaciones naturalmente fracturadas, un ácido emulsionado ofrecerá mejores resultados.

## 16.6 Conclusiones

La implementación de técnicas químicas como la estequiometría básica es de gran utilidad para determinar con mayor precisión el volumen de ácido necesario para disolver una roca carbonatada, en operaciones de estimulación ácida y fracturamiento ácido, con el fin de incrementar la producción de hidrocarburos en campos petroleros.

Esta metodología es inédita y, para su práctica, acudimos a la revisión de temas de química como es estequiometría. Requiere, además del conocimiento de tópicos como los registros geofísicos de pozos y las ecuaciones para discretizar parámetros asociados a las estimulaciones y fracturamientos de tipo ácido (muchas de esta información se encuentra de forma implícita en paquetería comercial funcionando como una caja negra).

La cuantificación de los volúmenes de ácido requeridos, una vez que se conocen las fracciones de los minerales que componen la roca, además de permitirnos decidir la cantidad para la disolución, optimiza los costos de operación y hace evidente el sustento de ingeniería en una operación de este tipo.





Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

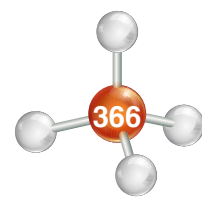
Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

El conocimiento de la distribución de las redes de fracturas en el caso de yacimientos fracturados, además del estatus geomecánico en la vecindad del pozo, puede mejorar los diseños de estimulación ya que impactará directamente en el área de contacto del ácido que se inyecte.

Para enriquecer esta metodología, pueden adicionarse a las ecuaciones estequiométricas, las fórmulas químicas de aditivos empleados en este tipo de operaciones, con lo que el cálculo del volumen de ácido requerido podría precisarse con mayor certeza.





# Capítulo 17

## Petrología y Química

Alfredo Victoria Morales, José Luis Arcos Hernández, Noé Santillán Piña, Yoalli Bianii Hernández Marmolejo

### 17.1 Introducción

La *petrología* es una ciencia que estudia cómo y de qué están conformados los materiales que constituyen nuestro planeta.

Es una rama de la Geología que se encarga del estudio de las rocas, asociaciones de minerales determinadas por las condiciones de presión, temperatura y composición química. Los minerales son sustancias químicas que, en condiciones particulares, forman una *especie mineralógica*. Si las condiciones termodinámicas cambian, aún conservando la misma composición química, se forma una nueva especie. Las asociaciones mineralógicas son, así, resultado de las propiedades termodinámicas y químicas de su ambiente de formación.

La relación entre la Petrología y la Química es directa: sin Química no hay Petrología. La composición química ha sido la base para la clasificación de los minerales desde el siglo XIX (Tabla 17.1).

<i>Elementos nativos</i>	<i>Nitratos</i>
<i>Sulfuros</i>	<i>Boratos</i>
<i>Sulfosales</i>	<i>Fosfatos</i>
<i>Óxidos</i>	<i>Sulfatos</i>
<i>Haluros</i>	<i>Tungstatos</i>
<i>Carbonatos</i>	<i>Silicatos</i>

Tabla 17.1. Clasificación Química de los Minerales (Strunz y Nickel en Klein y Dutrow, 2008).

Cuando se describen los componentes de las rocas y las relaciones espaciales que guardan entre sí, se trata entonces de *Petrografía*, parte de la Petrología, encargada del estudio de los minerales y de las proporciones de éstos en las rocas, su descripción y disposición espacial en el volumen de roca para clasificarla, es decir, asignarle un nombre. Por su parte, la *petrogénesis* nos permite determinar el origen de la roca, su procedencia, su ambiente de formación y los procesos que llevaron a su formación.

Por su origen, las rocas se clasifican en *ígneas*, *sedimentarias* y *metamórficas*.

### 17.2 Rocas ígneas

Las rocas ígneas resultan de la cristalización por descenso de la temperatura de un magma, es decir, de una masa de silicatos fundidos junto con gases, lo cual puede ocurrir en el interior de la

#### Sumario

##### 17.1 Introducción

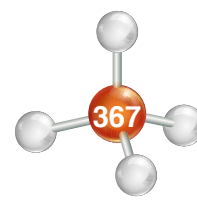
##### 17.2 Rocas ígneas

##### 17.3 Rocas sedimentarias

##### 17.4 Rocas metamórficas

##### 17.5 Distribución de las rocas en la República Mexicana

##### 17.6 Conclusiones





Tierra o en la superficie. El magma se produce cuando el manto de la Tierra se funde de manera parcial en zonas específicas produciendo *almacenes de magma* o *cámaras magmáticas*. El magma caliente asciende y en su trayecto puede enfriarse al llegar a zonas menos calientes, formando *rocas ígneas intrusivas* o *plutónicas*. Si llega hasta la superficie de la Tierra enfría en el mar o sobre la superficie de los continentes, forma *rocas ígneas extrusivas*. La diferencia entre estos dos tipos de rocas se encuentra en la forma de cristalización, el tamaño de sus cristales y en su arreglo, es decir, en su *textura* o *fábrica*.

Una de las primeras tareas de la Química, dentro de la Petrología, es determinar la composición química de las rocas ígneas.

### 17.2.1 Clasificación

Las rocas ígneas se clasifican por su contenido de minerales esenciales en porcentaje. Los minerales esenciales de las rocas ígneas son feldespatos alcalinos, plagioclasas, cuarzo y feldespatoides (Figura 17.1).

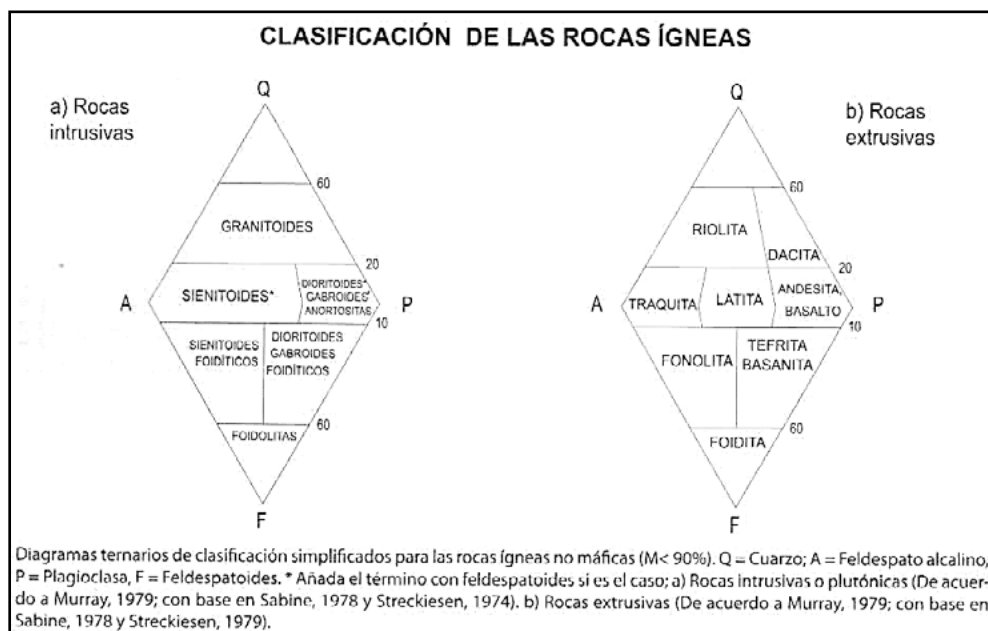


Figura 17.1. Tabla de clasificación de las rocas ígneas extrusivas e intrusivas. Se trata de dos diagramas ternarios ensamblados en los que la base del triángulo contiene a los vértices de feldespatos alcalinos representados por la letra A y en el otro vértice las plagioclasas representadas por la letra P. En cada vértice se tiene 100 % del grupo mineralógico que lo nombra, pero 0 % de los otros dos grupos (Figura tomada de Mendoza R., Silva R. & Campos M., 2014).

Existen cuatro tipos de texturas o fábricas que se distinguen en las rocas ígneas: *fanerítica*, *afanítica*, *vítrea* y *volcanoclástica*. Las primeras dos se refieren a tamaño predominante de grano desde  $10^{-6}$  hasta  $10^2$  m<sup>2</sup> (Best, M. y Christiansen, E., 2001). La textura *fanerítica* se aplica a las rocas cuyos minerales son lo suficientemente grandes como para ser identificados a simple vista o con lupa 10x. Esta textura es típica de rocas que cristalizaron lentamente de una intrusión magmática.

En las rocas de textura *afanítica* los cristales de los minerales son muy pequeños como para ser identificados a simple vista o con lupa, por lo que se requiere del análisis de una lámina delgada de la roca en un microscopio petrográfico o empleando algún otro método de laboratorio que garantice una identificación mineralógica precisa. La textura afanítica es más común en magmas que enfriaron rápidamente, aunque se han encontrado en zonas marginales y frías de intrusiones emplazadas en corteza somera. Algunas rocas magmáticas contienen una población bimodal de





tamaño de grano: a los granos más grandes se les llama *fenocristales*, mientras que a los de menor tamaño se les llama *matriz* o *pasta*. Esta textura es llamada *porfirítica* o *porfídica*. La combinación porfirítica afanítica es más común en las rocas que la combinación porfirítica fanerítica.

Las rocas de textura vítrea contienen cantidades variables de vidrio, en contraste con las *holocristalinas*, compuestas en su totalidad por cristales. Un *vitrófiro* es una roca de textura porfídica que contiene fenocristales dispersos en una matriz vítrea.

La fábrica constituida por fragmentos de cristales o fragmentaria de las rocas *volcaniclásticas* es producida por procesos volcánicos, principalmente explosivos en donde se generan fragmentos angulosos de vidrio, de rocas y de cristales de minerales. La clasificación de las rocas volcaniclásticas se realiza con base en el tamaño de sus constituyentes (Figura 17.2).

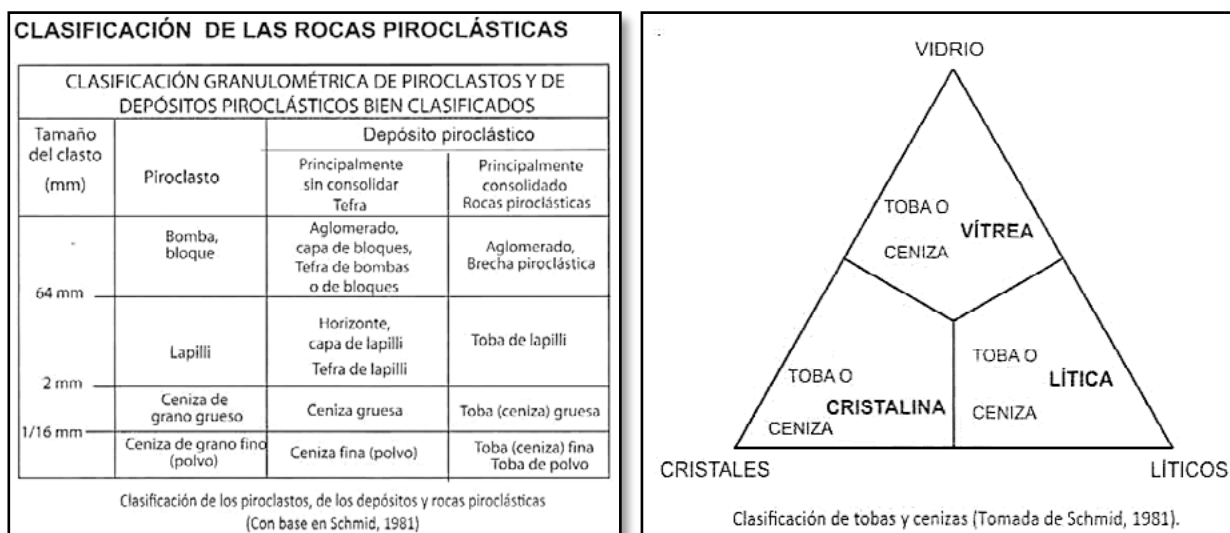


Figura 17.2. En el cuadro izquierdo se presenta la clasificación de los sedimentos piroclásticos por tamaño de grano: ceniza, lapilli, bombas y bloques. En el triángulo derecho se presenta la clasificación de las rocas piroclásticas por su contenido de cristales, líticos o vidrio. El término *toba* es usado para denotar a una roca compuesta por material piroclástico y no contempla implicación genética. (Figura tomada de Mendoza R., Silva R. & Campos M., 2014).

### 17.2.2 Composición química

Los *elementos mayores, mayoritarios* o *principales* son aquéllos que se presentan en un análisis químico de roca total y constituyen más del 0.1 % en peso de una muestra de toda la roca de 100 gramos y son SiO<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, FeO, MnO, MgO, CaO, Na<sub>2</sub>O, K<sub>2</sub>O y P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. La mayoría de las rocas ígneas están compuestas por estos óxidos en mayor o menor proporción. El término *elementos menores* se aplica a los elementos mayores que son menos abundantes en las rocas, como el fósforo y el manganeso. Los elementos traza constituyen menos del 0.1 % en peso, o en otros términos, son los elementos que se encuentran en proporción menor de 1000 ppm (partes por millón). Cuando el método de análisis no puede distinguir entre hierro férrico y ferroso se presenta como hierro total (Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>t o FeOt). La mayoría de las rocas ígneas contienen volátiles como agua, CO<sub>2</sub>, azufre, flúor y cloro. El agua presente es agua estructural o combinada en forma de ión hidroxilo (OH<sup>-</sup>) en anfíboles y micas y en limonita secundaria y arcillas y como agua molecular en vidrios. También se puede presentar como agua absorbida y encontrarse en poros. Las superficies de los granos se pueden eliminar calentando la muestra hasta 110 °C. El CO<sub>2</sub> presente se puede deber a carbonatos secundarios por alteración o intemperismo. Los volátiles totales en una roca pueden ser calculados si se pesa la muestra antes y después de calentarla a 1000 °C y determinar la pérdida por ignición (LOI). La mayoría de los análisis de roca total se recalculan a libre de



volátiles. En la Tabla 17.2 se muestra la composición química promedio de algunas rocas ígneas comunes.

	FONOLITA	SIENITA	TRAQUITA	GRANITO	RIOLITA	GRANO DIORITA	DACITA	DIORITA	ANDESITA
SiO <sub>2</sub>	57.43	59.63	62.31	71.84	73.95	66.91	65.98	58.34	58.70
TiO <sub>2</sub>	0.63	0.86	0.71	0.31	0.28	0.55	0.59	0.96	0.88
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	19.46	16.94	17.27	14.43	13.48	15.92	16.15	16.92	17.24
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2.85	3.09	3.04	1.22	1.50	1.40	2.47	2.54	3.31
FeO	2.07	3.18	2.33	1.65	1.13	2.76	2.33	4.99	4.09
MnO	0.17	0.13	0.15	0.05	0.06	0.08	0.09	0.12	0.14
MgO	1.09	1.90	0.94	0.72	0.40	1.76	1.81	3.77	3.37
CaO	2.78	3.59	2.38	1.85	1.16	3.88	4.38	6.68	6.88
Na <sub>2</sub> O	7.96	5.33	5.57	3.71	3.61	3.80	3.85	3.59	3.53
K <sub>2</sub> O	5.36	5.04	5.07	4.10	4.37	2.76	2.20	1.79	1.64
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0.18	0.30	0.21	0.12	0.07	0.18	0.15	0.29	0.21

Tabla 17.2. Composición química promedio de algunas rocas ígneas comunes. Tomada de Best, 2003.

Cuando el tamaño de grano no permite reconocer a los minerales presentes en la roca se trabaja con clasificaciones químicas de las rocas como la de la Figura 17.3 conocido como Diagrama TAS propuesto por Le Maitre en 1989. En dicho diagrama se grafican los óxidos principales o mayores del análisis químico de la roca total. En el eje de las abscisas se grafica el contenido de sílice en porcentaje, mientras que en el eje de las ordenadas se grafica la suma de los óxidos de sodio y potasio. La pareja ordenada ubica un punto en el diagrama proporcionando la clasificación de la roca.

Los elementos menores y los elementos traza proporcionan información importante acerca de los procesos por los que ha pasado la roca y también del ambiente tectónico en el que se produjo. Los elementos traza se analizan por elemento no por óxido. Para mayor información sobre los diagramas de discriminación tectónica y uso de elementos traza ver Rollinson, 1993.

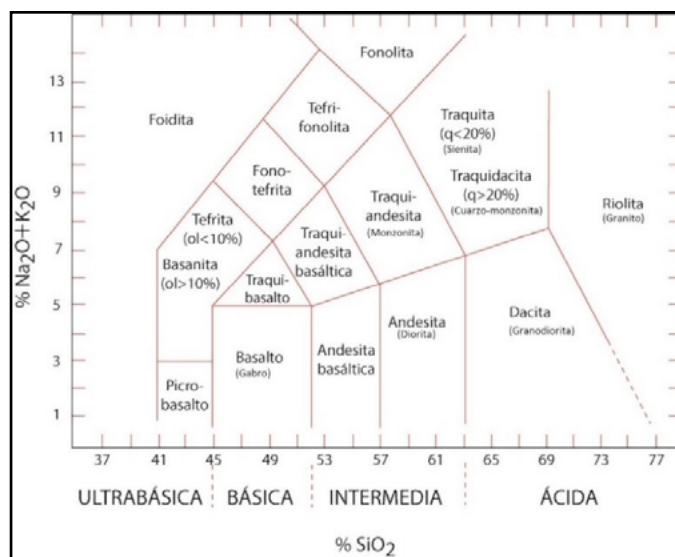


Figura 17.3. Clasificación química de las rocas de textura afánítica y vítreas, conocido como diagrama TAS (Le Maitre, 1989 en Best, 2003). En el eje de las ordenadas se tiene la suma de los óxidos de sodio y de potasio, mientras que en el eje de las abscisas se grafica el contenido de sílice.

### 17.3 Rocas sedimentarias

Para su formación, estas rocas requieren de una cuenca sedimentaria en donde depositarse. Este grupo, por el proceso que origina a sus sedimentos, se divide en **rocas clásticas** y **rocas químicas**. Las primeras, también llamadas **terrígenas**, son producto de la erosión, transporte y depósito de rocas pre-existentes. Las rocas sedimentarias químicas se forman por cristales que se precipitan de una solución saturada formando rocas a veces mono-minerálicas como las **calizas** y las **dolomías**. Las calizas son rocas que están constituidas principalmente por calcita, la cual es químicamente un carbonato de calcio, CaCO<sub>3</sub>, mientras que la dolomía es una roca compuesta por dolomita, la que también es un carbonato de calcio y magnesio, (Ca, Mg)CO<sub>3</sub>.



### 17.3.1 Rocas sedimentarias químicas

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

Las rocas sedimentarias químicas son, principalmente, las calizas, las dolomías y las evaporitas. Las más abundantes son las calizas, clasificadas según su textura depositacional. La clasificación más empleada es la de Dunham, propuesta por primera vez en 1962 (Figura 17.4) en la que el criterio fundamental de subdivisión es la naturaleza de la estructura del sedimento. Así, se subdividen en **lodo soportado** y **grano soportado**. La primera categoría implica baja energía hidráulica de depósito, mientras que la otra acusa alta energía durante el mismo. Las calizas con muy pocos granos, menos del 10%, en una matriz de lodo calcáreo se llaman **calizas de textura mudstone**. Cuando hay más del 10% de granos, pero éstos son insuficientes para estar en contacto unos con otros, se trata entonces de la **textura wackestone**. Las calizas en las que sus granos se tocan se llaman **packstones** o **grainstones**. La caliza de textura packstone presenta matriz de lodo calcáreo y debe su soporte de grano a la compactación; mientras que la caliza grainstone es grano soportada desde su depósito y normalmente tiene cementante en los espacios intergranulares. En la caliza de **textura boundstone**, la fábrica acusa que los componentes originales se mantuvieron juntos durante el depósito, como en un arrecife. En 1971 Embry y Klovan subdividieron a la textura boundstone en **calizas de arrecife autóctonas** y **alóctonas** (Figura 17.5).

TEXTURA DE DEPÓSITO RECONOCIBLE				TEXTURA DE DEPÓSITO NO RECONOCIBLE	
Componentes originales no aglutinados durante el depósito		Componentes originales aglutinados durante el depósito		Recristalizada diagenéticamente	
Contiene lodo calcáreo <20 µm		Sin lodo			
Soportada por lodo		Soportada por granos		CALIZA CRISTALINA	
<10% de granos	>10% de granos				
MUDSTONE	WACKESTONE	PACKSTONE	GRAINSTONE	BOUNDSTONE	

Figura 17.4. Clasificación de las calizas según Dunham (1962), basada en naturaleza de la estructura de los sedimentos carbonatados, se subdividen en lodo soportado o grano soportado, la primera categoría implica baja energía hidráulica de depósito, mientras que la otra acusa alta energía durante su depósito. Es importante señalar que solo aplica para carbonatos marinos. (Figura tomada de Mendoza R., Silva R. & Campos M., 2014).

		Clasificación de Embry & Klovan (1971)		Dunham (1962)
ALÓCTONAS	Componentes originales no unidos al momento del depósito (Más del 10% de aloquímicos y estos miden > 2 mm.)	Soportada por lodo	Floatstone 	Wackestone
		Soportada por granos	Rudstone 	Packstone  Grainstone
AUTÓCTONAS	Componentes originales unidos al momento del depósito	Colonias ramificadas separadas por sedimentos finos o detritos. (Fueron trampa de sedimentos)	Bafflestone 	Boundstone
		Colonias laminares que incrustan fragmentos de fósiles y sedimentos finos.	Bindstone 	
		Trama rígida de colonias, conchas y esqueléticas. Cavidades internas rellenas de sedimento fino, detritos y cemento cristalino.	Framestone 	

Figura 17.5. Clasificación de las calizas de arrecife por Embry y Klovan, 1971. Estos autores subdividen a la textura boundstone en calizas de arrecife autóctonas y alóctonas, las primeras son aquellas en que sus componentes originales no están unidos al momento del depósito, mientras que en las autóctonas sus componentes originales están unidos al momento del depósito. (Figura tomada de Mendoza R., Silva R. & Campos M., 2014).





### 17.3.2 Ambiente de formación

Los sedimentos carbonatados son depositados en muchos ambientes: en aguas oceánicas profundas, someras, frías y cálidas y, en menor proporción, en lagos, ríos, cuevas y dunas dentro del continente. En los ambientes marinos se presentan en los litorales de energía hidráulica baja y alta, que incluye playas, barras y planicies de marea. También se depositan en plataformas, en taludes y en cuencas marinas profundas.

### 17.3.3 Carbonatos terrestres

La exposición de rocas calcáreas a un ambiente de aguas meteóricas produce una zona intemperizada dentro de la cual se genera disolución y erosión formando karst. El  $\text{CaCO}_3$  en solución precipita sobre superficies como *esplotemas* y *caliche*.

Las aguas de arroyos, manantiales y ríos, a menudo, están subsaturados con  $\text{CaCO}_3$ ; sin embargo, pueden llegar a saturarse si pasan a través de rocas y sedimentos calcáreos. La precipitación del carbonato ocurre en manantiales calientes, cascadas y caídas de agua que proporcionen  $\text{CO}_2$ . Este material precipitado se llama *travertino* y *tufa* si es muy poroso y está asociado con algas y musgos. Los carbonatos lacustres se dividen en *carbonatos de agua dulce* y *carbonatos de agua salada*. En el lago de agua dulce el carbonato precipita de las aguas superficiales debido a las altas temperaturas y a la pérdida de  $\text{CO}_2$ . Los lagos salinos se forman en cuencas endorreicas en las que la salida de agua está restringida y la evaporación excede la entrada de agua. Los carbonatos eólicos se forman cerca de líneas de costa carbonatadas: los sedimentos de dunas costeras son transportados por fuertes y persistentes vientos de las playas.

Los diferentes ambientes con presencia de carbonatos marinos se resumen en la Figura 17.6 donde se muestra la distribución de facies de Wilson en plataforma y cuenca carbonatada. Aparte de muchas otras características de cada sub-ambiente, Wilson asocia con cada uno de ellos las texturas formadas por los procesos que ahí se llevan a cabo. En una cuenca profunda hay una textura depositacional de mudstone; en el sub-ambiente de plataforma, texturas wackestone; en el margen de la plataforma, texturas de tipo mudstone, mientras que un talud puede presentar calizas con texturas de wackestone a packstone. En ambiente arrecifal se observa la presencia de texturas predominantemente boundstone y, con menor frecuencia, de grainstone y packstone; las arenas de margen tienen grainstones; en la laguna de plataforma, texturas desde tipo grainstone hasta mudstone y en la plataforma restringida, estructuras que varían de mudstone, grainstone y wackestone (Figura 17.6).

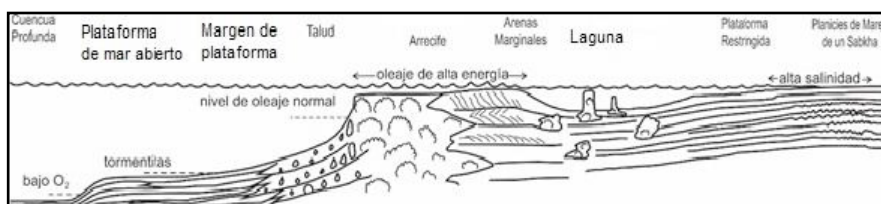


Figura 17.6. Facies de Wilson y la presencia de rocas carbonatadas. Para cada ambiente y sub-ambiente se presentan rocas que pueden tener texturas depositacionales características, como el caso de rocas con textura boundstone en el ambiente de arrecife, o mudstone laminado en la cuenca profunda (Figura tomada de Scoffin, 1987).

### 17.3.4 Rocas sedimentarias clásticas

Las rocas sedimentarias clásticas son producto de la erosión de rocas preexistentes, pudiendo ser ígneas, metamórficas o, incluso, otras sedimentarias. Los fragmentos son transportados por el agua, el viento o hielo hacia una cuenca, para convertirse en roca, mediante un proceso conocido como *diagénesis*. Es durante este proceso cuando ocurren reacciones químicas importantes como

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22



la cementación, donde se produce la precipitación de minerales que aglutinan a los diferentes sedimentos acumulados.

Las rocas sedimentarias clásticas son producto de la litificación de sedimentos. Los sedimentos son clasificados según su tamaño, en arcilla, limo, arena o grava (Figura 17.7).

### 17.3.5 Clasificación

Las rocas que se forman de sedimentos del tamaño de la arcilla se llaman *lutitas*, las del tamaño del limo, *limolitas*, las de arena, *areniscas* y las de grava, *conglomerados*.

Los conglomerados se clasifican de acuerdo con el carácter petrogenético de sus clastos y el porcentaje de lodo (limo y arcilla) y arena para su matriz (Figura 17.8).

La clasificación de las areniscas se basa en el porcentaje de partículas mono-minerálicas como cuarzo y feldespatos y fragmentos de roca (Figura 17.9).

coloidal		lodo		arena					grava			bloque									
		arcilla	limo						guijarro	canto											
	muy fina	finas	media	gruesa	muy fina	fino	medio	gruesa	muy fina	finas	media	gruesa	muy gruesa	gránulo							
	12	11	10	9	8	7	6	5	4	3	2	1	0	-1	-2	-3	-4	-5	-6	-7	-8
	0.25	0.5	1	2	4	8	16	32	63	125	250	500	1000	2	4	8	16	32	64	128	256
													micras								

Figura 17.7. Escala para tamaño de partículas según Wentworth. Se muestran los tamaños para arcilla, limo, arena, grava en milímetros y en unidades  $\phi$ . (Figura tomada de Mendoza R., Silva R. & Campos M., 2014).

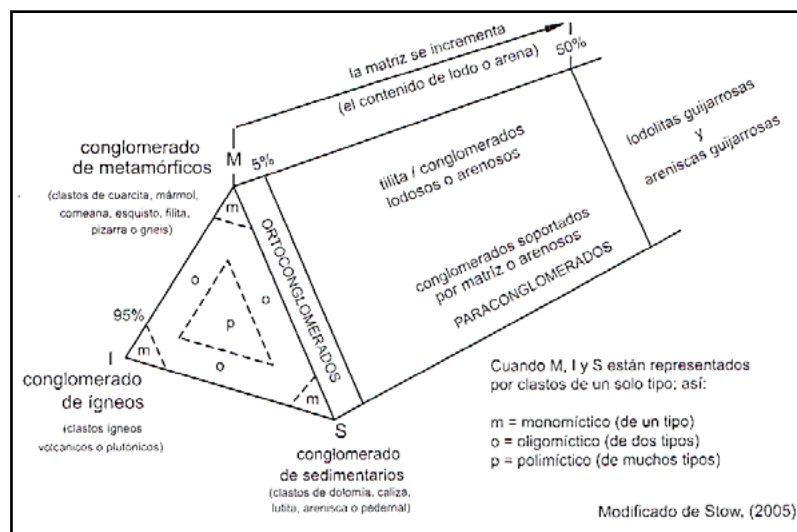


Figura 17.8. Tabla de clasificación de los conglomerados. Se distinguen por su contenido de matriz: si es menor del 5 %, se trata de ortoconglomerados, mientras que si presenta más del 5 % de matriz se clasifica como paraconglomerados. (Figura tomada de Mendoza R., Silva R. & Campos M., 2014).

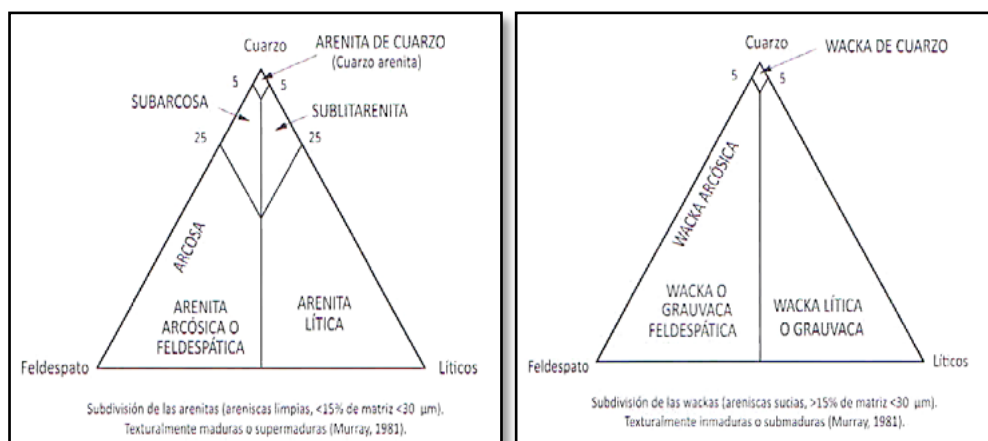


Figura 17.9. Tabla de clasificación de las areniscas. (Figura tomada de Mendoza R., Silva R. & Campos M., 2014).





### 17.3.6 Ambiente de formación

Se pueden encontrar rocas clásticas tanto en el continente, como en los ambientes de transición, así como en los ambientes marinos. En un ambiente sedimentario continental de abanico aluvial aparecen conglomerados en las facies proximales, areniscas en las facies medias y distales y lutitas en las facies distales. En los lagos intermontanos se depositan rocas de grano fino, principalmente lutitas y limolitas. Los ambientes fluviales originados en las montañas presentan conglomerados, areniscas, limolitas y lutitas. Dependiendo de la energía hidráulica es la capacidad de carga de sedimentos y sus depósitos. Un río podrá depositar conglomerados si presenta energía alta, lo cual ocurre en las zonas de gradiente topográfico alto. En las zonas de planicie, ya cerca de las líneas de costa, el río tendrá menor capacidad de carga y depositará más sedimentos finos, lutitas, limolitas y areniscas de grano fino. En la zona de costa las rocas más comunes son las areniscas, que constituyen la playa, las barras, etc. En la zona marina están presentes todas las rocas clásticas, desde la plataforma hasta la cuenca. En la zona de talud, las rocas clásticas más comunes son las areniscas, lutitas y limolitas formando paquetes de turbiditas.

### 17.4 Rocas metamórficas

Las rocas metamórficas se forman por la recristalización de rocas pre-existentes sometidas a nuevas condiciones de presión y temperatura. Las diferentes combinaciones de ambas producen neo-formación de minerales en estado sólido, sin intercambio químico, es decir, la composición química permanece constante. A las rocas pre-existentes que se convierten en rocas metamórficas se les llama *protolito*, término que, literalmente, quiere decir “primera piedra”. Algunos protolitos de rocas metamórficas comunes son los siguientes (Tabla 17.3).

Protolito	Roca metamórfica
CALIZA	MÁRMOL
ORTOCUARCITA (ARENISCA DE CUARZO)	CUARCITA
LUTITA	ESQUISTO
BASALTO	ECLOGITA

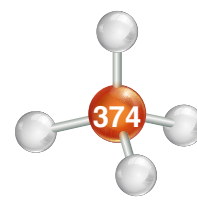
Tabla 17.3. La tabla muestra ejemplos de roca pre-existente que, al variar las condiciones de presión y temperatura, dio lugar a una roca nueva, con la misma composición química.

#### 17.4.1 Tipos de metamorfismo

El inicio del metamorfismo sucede al término de la *diagénesis*, es decir, cuando terminan de formarse las rocas sedimentarias y culmina cuando inicia la *anatexis* o *fusión de las rocas*. Dependiendo de su ubicación, el metamorfismo se divide en dos grandes grupos: local y regional. Son variantes del metamorfismo local el de contacto, el cataclástico, el hidrotermal, el de impacto, el óptico o pirometamorfismo y el metasomatismo. En el segundo grupo se incluyen el metamorfismo regional dinamo-térmico, de sepultamiento o litostático y el metamorfismo suboceánico.

#### 17.4.2 Estructuras

Las rocas metamórficas pueden presentar *estructuras orientadas* y *no orientadas*. Las primeras pertenecen al grupo del metamorfismo regional y cataclástico, mientras que las segundas son de metamorfismo de contacto. Aquellas estructuras en las que los minerales se agrupan de manera orientada en planos o en líneas se llaman *foliación* y *lineación*. La foliación es la orientación de los minerales en planos paralelos y se divide en tres tipos: *pizarrosidad* o *crucero pizarroso*, *esquistosidad* y *bandeamiento*. En el crucero pizarroso es más fácil su ruptura en láminas delgadas, en la esquistosidad hay ruptura en planos menos paralelos y más gruesos, mientras que en el bandeamiento es más difícil la ruptura de la roca en planos. La lineación es la orientación de





los minerales alargados, prismáticos o aciculares en direcciones preferenciales. Con base en la estructura de las rocas metamórficas fue establecida una clasificación para muestra de mano muy útil para el campo.

### 17.4.3 Facies metamórficas

Uno de los primeros intentos por clasificar a las rocas metamórficas a escala regional fue realizado por Barrow (1893) mientras trabajaba en las Tierras Altas (Highlands) de Escocia, cartografió zonas de rocas progresivamente metamorfoseadas, a las cuales nombró según los minerales presentes en ellas: franja de la clorita, biotita, granate, estauroлита, cianita y silimanita, listadas en orden de intensidad de metamorfismo, de menor a mayor. Denominó isograda a la parte exterior de la franja donde el mineral índice apareció por primera vez.

Eskola (1920), trabajando con rocas metamórficas de contacto de la región de Orijarvi, en Finlandia, fue el primero en apreciar las amplias relaciones entre asociaciones minerales, composición de las rocas y presiones y temperaturas del metamorfismo. Notó que en regiones suficientemente pequeñas como para experimentar las mismas condiciones de metamorfismo, las asociaciones minerales fueron determinadas sólo por la composición de la roca, pero que rocas de diferentes áreas que estaban dentro de rangos similares de composición podrían tener asociaciones minerales muy diferentes. Atribuyó este evento a diferentes condiciones de metamorfismo. Incorporó estas observaciones al concepto de facies mineralógicas metamórficas, a las que denominó *paragénesis*, asociación mineralógica en equilibrio formada por determinada composición química de una roca, en ciertas condiciones de temperatura y presión. En la figura 17.10 se presenta el cuadro de las facies metamórficas definidas hasta ahora para los ambientes geotectónicos, es decir, las asociaciones mineralógicas dadas para determinadas condiciones de presión y temperatura. La combinación de intervalos de presión y temperatura proporciona una zona específica del cuadro. Así entonces se tiene la zona de la facies zeolita, que va de los 0 hasta los 6 kilobares de presión, lo que equivale a una profundidad de 0 hasta 20 km y de los 0 hasta los

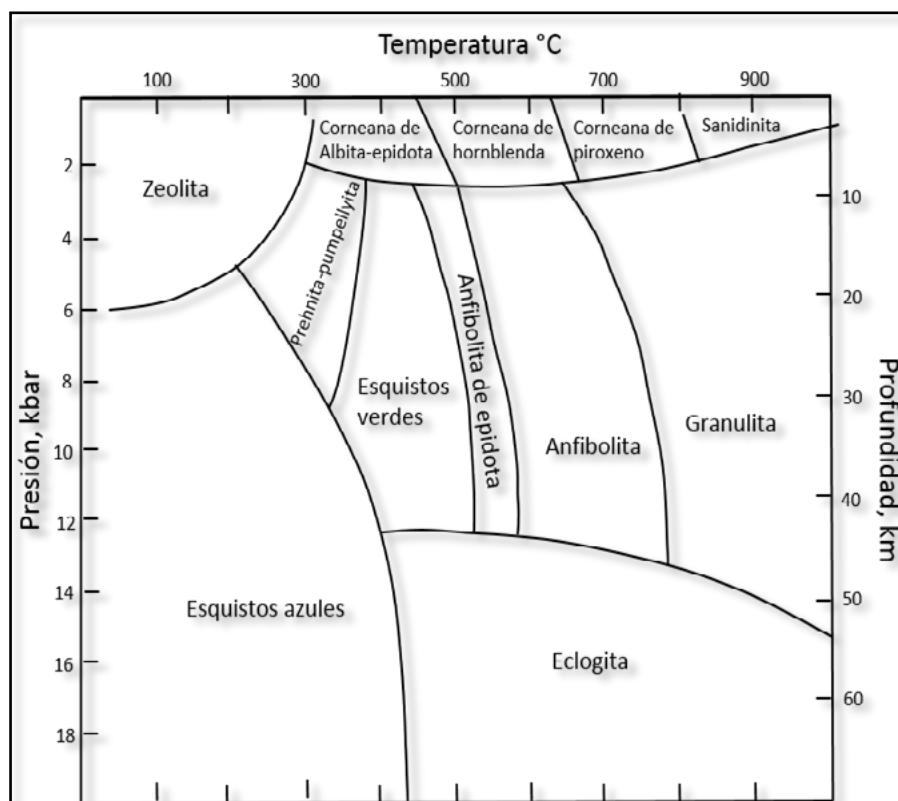


Figura 17.10. Las facies metamórficas y sus condiciones de presión y temperatura. Asociaciones minerales o paragénesis que, dada una composición química definida, se forman bajo las mismas condiciones de presión y temperatura. Para cada facies mineralógica metamórfica existen rangos de temperatura y presión en los que pueden coexistir asociaciones mineralógicas en equilibrio (Figura tomada de Spear, 1993).



300°C. Otras facies que se consideran de baja presión desde 0 hasta los 2 kilobares son la corneana de albita-epidota para una temperatura de 300°C hasta 450°C; la corneana de hornblenda de 450°C hasta 630°C; la corneana de piroxeno en un rango de temperatura desde los 630°C hasta los 800°C y por último la facies sanidinita con temperaturas que van desde los 800°C hasta los 1000 °C. Las facies de más de 2 kilobares son prehnita-pumpellyita hasta los 8 kilobares y con un rango de temperatura que va de los 200°C hasta casi los 400°C, al incrementar la temperatura hasta casi los 500°C se tiene la facies de esquistos verdes con mayor presión hasta los 12 kilobares equivalentes a los 45 km de profundidad, más o menos para esta misma presión pero con rango más altos de temperatura se tiene la facies de anfibolita con temperaturas de hasta los 750°C. Finalmente la facies de mayor temperatura en estos rangos de presión es la facies granulita que alcanza los 1000°C.

La facies considerada de alta presión es la facies de esquistos azules. Con temperaturas relativamente bajas hasta los 300°C, pero presiones que van desde los 6 kilobares hasta los 18, equivalentes a profundidades desde los 20 km hasta los 60 km, propia de las zonas profundas de la zona de subducción. Por último, la facies considerada de más alta presión y más alta temperatura, propias del manto, es la facies eclogita con presiones de más de 12 kilobares y temperaturas de más de 400°C.

En el campo, es necesario contar con un criterio de clasificación de las rocas metamórficas puesto que ahí el investigador no posee aparatos sofisticados, ni equipos de laboratorio. Utiliza, entonces la *clasificación textural* (Tabla 17.4), la cual implica observar si la estructura es foliada o no foliada y el tamaño de las partículas constitutivas. Así mismo, debe identificar a los minerales formadores de roca a escala de muestra de mano como el cuarzo, los feldespatos, etc.

Estructura	Granulometría	CARACTERÍSTICAS	MINERALOGÍA	NOMBRE
FOLIADA	De grano fino	Lustre polvoriento Partición muy nítida (Foliación perfecta) No se observa el grano Más densa que la lutita	No observable a simple vista	PIZARRA
		Aspecto sedoso Partición ondulada Con algunos minerales observables a simple vista	Algunos minerales de mica o de anfíbol	FILITA
	De grano grueso	Partición imperfecta, aspecto hojoso Orientación subparalela de los minerales Porfiroblastos ocasionales Foliación delgada	Mica - abundante Cuarzo - común Feldespato - perceptible Anfíbol	ESQUISTO
		Alternancia de bandas de minerales claros y oscuros Foliación gruesa Fractura en bloques	Feldespato - abundante Mica - común Cuarzo - común Anfíbol - común	GNEIS
NO FOLIADA	Granular masiva	Intercrecimiento de cristales Efervece con ácido clorhídrico diluido Roca suave	Calcita	MÁRMOL
		Tiende a un grano equigranular Se fractura en los granos, no alrededor de ellos Aspecto casi vítreo Más tersa al tacto que una arenisca	Cuarzo	CUARCITA

Tabla 17.4. Tabla de clasificación de las rocas metamórficas por su tamaño y orientación de los minerales constituyentes. La foliación es la estructura plana dominante en las rocas metamórficas, producto del arreglo en capas de diferente composición a una escala fina y del ordenamiento paralelo de los minerales de cristales planos como las micas. (Figura tomada de Mendoza R., Silva R. & Campos M., 2014).



#### 17.4.4 Ambiente de formación

Los ambientes de formación de las rocas metamórficas presentan una combinación adecuada de presiones y temperaturas desde la superficie de la Tierra hasta más de 60 km de profundidad. La ubicación de las zonas propicias para el metamorfismo es proporcionada por la Tectónica de Placas. En la Figura 17.11 se muestran las zonas probables para presentar las facies metamórficas congruentes con la presión y temperatura propias de cada una de ellas. En la zona de subducción se aprecian las zonas de alta presión, (facies de esquistos azules), donde penetra la porción de placa oceánica bajo la placa continental. La zona de aumento de calor se orienta hacia la cuña del manto donde se encuentran las cámaras magmáticas generadas por la fusión parcial. Entre la zona de presión y de temperatura es donde se observa la zona de metamorfismo regional con sus diferentes facies.

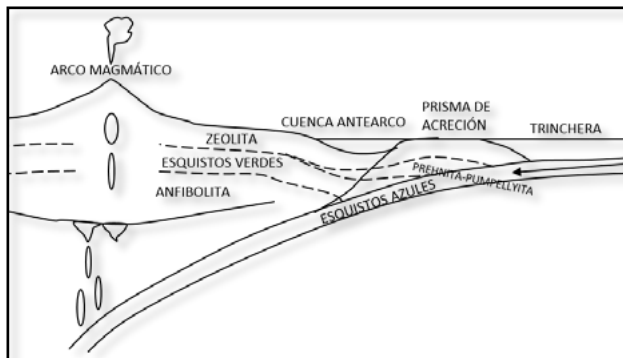


Figura 17.11. Zona de subducción que muestra la probable zona de ubicación de las diferentes facies metamórficas. (Figura tomada de Best, 2003).

#### 17.5 Distribución de las rocas en la República Mexicana

La siguiente es una breve descripción de los diferentes tipos de rocas que se encuentran en la República Mexicana, divididas por su edad, origen, características petrológicas y distribución. Ocasionalmente se incluye información sobre recursos mineros o energéticos.

##### 17.5.1 Distribución de rocas ígneas

###### 17.5.1.1 Rocas vulcano-sedimentarias del Fanerozoico

La Formación Alisitos, a la que se atribuye una edad del Cretácico, aflora en la región occidental del Estado de Baja California. Corresponde a una secuencia de rocas vulcano-sedimentarias marinas que incluye tobas, pórfidos, aglomerados y derrames de composición andesítica predominante, intercaladas con arenisca, lutitas y calizas con abundantes fósiles del Aptiano-Albiano. En Sinaloa aparece la Formación Vuelta del Cerro, litológicamente semejante a Alisitos. Se encuentra también el complejo ofiolítico de Bacurato.

Otras localidades donde se han encontrado rocas volcanosedimentarias del Fanerozoico se ubican en Baja California Sur: Isla de Cedros, donde aflora la Formación Eugenia, del Jurásico Inferior; la Formación San Hipólito, del Tríasico, perteneciente al cinturón orogénico Cedros Margarita, en la Península de Vizcaíno. En Sonora, en las regiones de El Antimonio, Sierra de López, Quitovac y San Luisito, también del Jurásico Inferior. Otras, se localizan en Guanajuato y Chiapas.

Sólo se han reportado rocas vulcano-sedimentarias del Paleozoico en la región de Juchatengo, Oaxaca, donde aflora una secuencia de pizarras, grauvacas y lavas almohadilladas y diques de composición básica, afectadas por un ligero metamorfismo en facies de esquistos verdes, cortadas por rocas granítico dioríticas con edad K-Ar de 289 a 219 Ma. (Grajales-Nishimura, 1988).

###### 17.5.1.2 Rocas volcánicas del Mesozoico

La Andesita Pueblo Viejo, andesitas continentales con un espesor aproximado de 100 m, afloran en los estados de Oaxaca y Chiapas, fechadas por métodos radiométricos con edades de 140 a 160

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

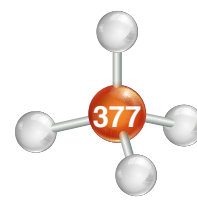
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22







Ma. Aparecen igualmente en la Sierra del Diablo, entre los límites de Chihuahua y Coahuila donde afloran rocas ignimbríticas de edad Jurásico Inferior.

### 17.5.1.3 Rocas vulcano-sedimentarias del Terciario

Corresponden con rocas volcánicas de la serie calco-alcalina de basalto a riolita, con intercalaciones de arenisca y conglomerado. A estas secuencias pertenecen la Formación Comondú, en Baja California Sur, Formación Báucarit del estado de Sonora y el Grupo Balsas del sur de México.

### 17.5.1.4 La Sierra Madre Occidental (SMO) o Franja Ignimbrítica Mexicana

Esta franja abarca una extensa meseta volcánica afectada por grabens y fallas normales que ocasionan que en sus flancos pierda su apariencia horizontal. El lado occidental constituye un borde abrupto con fallas normales de grandes desplazamientos y zonas formadas por profundas barrancas (Morán-Zenteno, 1985).

La SMO es la secuencia volcánica más extensa y espectacular de la República Mexicana. Corresponde a un depósito de ignimbritas, magmatismo silícico explosivo, con un volumen cercano a los 400 000 km<sup>3</sup>, distribuidos en un espacio de 1 000 km de longitud, un ancho promedio de 250 km y un espesor que varía de 1 000 a 2000 metros. Parece no tener igual en ningún otro lugar de la tierra. El mayor volumen de rocas fue extruido en un periodo muy corto comprendido entre los 32 y 28 millones de años Oligoceno. Hacia el sur se tienen registrados episodios volcánicos del Mioceno.

MacDowell y Clabaug (1981) determinaron dos intensos periodos de actividad magmática: el Complejo Volcánico Superior y el que lo subyace mediante un hiato, llamado Complejo Volcánico Inferior.

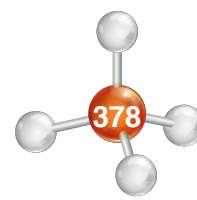
El Complejo Volcánico Inferior está representado por eventos ígneos bimodales que incluyen ignimbrita, lavas y batolitos compuestos, y, alcanza espesores de hasta 2000 m. No siempre está expuesto y sus rocas están fuertemente deformadas por efectos de la tectónica posterior. Las edades obtenidas para esta secuencia de rocas varían de 102 hasta 45 Ma. Aparentemente este complejo es la continuidad meridional más joven de la Sierra Nevada y de la Sierra de Batolitos Peninsulares.

El Complejo Volcánico Inferior presenta una alteración hidrotermal muy intensa, la cual favoreció el depósito de abundantes yacimientos minerales de metales preciosos y metales base, generalmente dispuestos en el sistema de fallas que presenta la Sierra Madre Occidental en sus bordes. Las más importantes son las orientadas NW-SE.

### 17.5.1.5 Faja Volcánica Transmexicana (FVT)

Esta faja constituye un arco continental formado por cerca de 8000 estructuras volcánicas, con algunos cuerpos intrusivos y se extiende desde las costas de Bahía de Banderas, Jalisco, hasta Palma Sola, Veracruz. Tiene una longitud de 1000 km de longitud, con un espesor que varía de 80 a 230 km (Gómez-Tuena et al., 2006). Está formado por una gran variedad de rocas volcánicas emitidas a través de importantes aparatos volcánicos desde el Mioceno medio hasta nuestros días. Es, por tanto, una provincia volcánica activa.

Incluye varios estratovolcanes de dimensiones muy variables, entre lo que destacan los picos más altos de México: el Pico de Orizaba, el Popocatepetl y el Iztaccíhuatl, formados por emisiones alternantes de productos piroclásticos y derrames lávicos. Se encuentra también una gran







cantidad de conos cineríticos, surgidos en tiempos más cercanos como el Xitle y, muy recientemente, como el Jorullo y el Parícutín.

La FVT presenta una gran variedad litológica y tectónica, por lo que se ha dividido en tres regiones: una zona occidental entre el Golfo de California y la junta triple de los rifts Zacoalco, Chapala y Colima, una porción central comprendida que termina en el sistema de fallas Taxco-San Miguel Allende y la porción oriental, que llega hasta el Golfo de México.

Se reconoce también una gran diversidad petrogenética: son abundantes los derrames y depósitos piroclásticos de composición andesítica y basáltica, además se han reportado unidades dacíticas y riolíticas, así como actividad riolítica en las calderas de la Primavera, en Jalisco, y Los Azufres, en Michoacán. Han sido localizados importantes centros de energía geotérmica y domos riolíticos en Tequila y Magdalena, Jalisco, lugar en el que también existen yacimientos de ópalo, la piedra nacional, la más importante gema que se produce en nuestro país.

Se calcula un volumen de 4 000 km<sup>3</sup> de material extruido en la FVT, con una evolución tectónica muy compleja, originalmente considerada como una estructura producida por la subducción de la placa de Cocos con Norteamérica. El que su disposición no sea paralela a la trinchera se explicaba por medio de un modelo que muestra cómo la dirección del corrimiento de la placa de Cocos y su diferente densidad no es perpendicular a la trinchera. Esta teoría es apoyada por el carácter calco-alcalino de algunas rocas. En estudios recientes la geoquímica de otros afloramientos indica un carácter alcalino para muchas rocas de esta estructura, lo que lo relaciona con un vulcanismo intra-placa.

### 17.5.1.6 Arco Volcánico Chiapaneco

Esta formación tiene una edad que va del Plioceno al Reciente y constituye una franja NW-SE limitada por la FVT y el arco volcánico de Centroamérica.

### 17.5.2 Distribución de las rocas metamórficas

En México es posible encontrar cualquier tipo de roca metamórfica: han sido registrados especímenes de diferentes ambientes tectónicos (baja, mediana y alta presión) en distintos puntos de nuestro territorio, lo que abarca todos los tipos de metamorfismo, y todas las facies, con excepción de rocas en facies de sanidinita de las cuales no existe referencia. Sus edades van desde el Proterozoico, como las rocas de Caborca, en Sonora, hasta el Cretácico, como las rocas del Complejo Xolapa, en el sur de Guerrero y sur de Oaxaca.

En algunos lugares afloran ventanas estructurales o han sido detectadas en pozos de exploración petrolera, al oriente del país. Son abundantes sus zonas de exposición en la Sierra Madre del Sur, donde se ha acrecionado una serie de terrenos tectono-estratigráficos de compleja evolución tectónica cuyos basamentos son un complejo de rocas cristalinas con predominancia de rocas metamórficas.

#### 17.5.2.1 Rocas metamórficas del Precámbrico

##### Complejo Bamori

Las rocas más antiguas de México afloran en el estado de Sonora y representan la continuación de formaciones semejantes del cratón de Norteamérica (Ortega, op.cit.). Se han dividido en dos unidades debido a que se localizan a ambos lados de la megacizalla Mojave-Sonora: el Complejo Bamori aflora al sudoeste de la estructura y está constituido por gneises en facies de anfibolita con edad del protolito de 1780 Ma y edad del metamorfismo de 1650 Ma. La segunda unidad, correlacionable con el Esquisto Pinal del sudoeste de los Estados Unidos, aflora al noreste de la



estructura y está constituida por rocas en facies de esquito verde con edad del protolito de 1700 Ma y de metamorfismo de 1640 Ma.

En el estado de Chihuahua, en la Sierra del Cuervo y Placer de Guadalupe aflora una secuencia de rocas de edad Grenvilliana, constituida por anfibolitas con horizontes de gneises cuarzo feldespáticos, cortados por pegmatitas simples sin y post metamórficas.

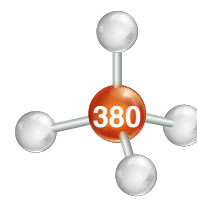
### Complejo Oaxaqueño

Las rocas más antiguas del sur de México pertenecen al **Complejo Oaxaqueño**. Afloran en el sureste del estado de Puebla y en la parte central del estado de Oaxaca: es el basamento del Terreno Zapoteco. Está formado por una secuencia de paragneises y ortogneises, cuyas edades varían de los 1200 a 900 millones de años. Muestran, por tanto, una evolución metamórfica ocurrida durante un gran periodo geológico.

Los paragneises del Complejo Oaxaqueño son los que ocupan mayor área de afloramiento: corresponden con una secuencia de gneises cuarzo feldespáticos de biotita que alternan con gneises pelíticos de sillimanita y granate y, en ocasiones, con grafito, mineral que puede presentarse en concentraciones económicas. Por tratarse de un material formado a altas temperaturas, aquí se ubican los únicos yacimientos de grafito cristalino del país. También han sido localizados cuerpos de mármoles impuros entre los que destacan los mármoles de olivino, diópsida, flogopita y antigorita, asociados a los mármoles calsilicáticas de diópsida, escapolita, calsilicáticas de wollastonita y cuarzo. Los paragneises presentan cuerpos de pegmatitas sin y post-metamórficas, algunas simples, constituidas únicamente por cuarzo y feldespato, y otras complejas, formadas por clinopiroxenos, esfena, zircón, flogopita y minerales radiactivos. La secuencia de ortogneises está caracterizada por gneises cuarzo feldespáticos con biotita, cuerpos de charnoquitas distribuidos en distintas posiciones estructurales del Complejo y cuerpos anortosíticos. Las charnoquitas son las rocas índice del Complejo Oaxaqueño, ya que presentan la paragénesis típica de la facies de granulita, que incluye la presencia de ortopiroxeno, lo cual indica condiciones de ultrametamorfismo para ese periodo geológico. Al igual que en otros terrenos de edad Grenvilliana, se observan cuerpos de anortositas, en la sección norte, considerada el núcleo del Complejo. Estas rocas corresponden a una secuencia de metanortositas con bandas y lentes de metagabros y, en algunos niveles, lentes y nódulos de nelsonita, roca formada por ilmenita y apatita que le dan a esta región un potencial por titanio. En la parte sur del Complejo se encuentra una secuencia de metanortosita alcalina, caracterizada por presentar además de las plagioclasas, feldespato potásico formando antipertitas. En Pluma, Hidalgo, fue explotado un yacimiento con abundante rutilo en este tipo de rocas, las cuales presentan también intercalaciones de metagabros y anfibolitas.

### Otros afloramientos de rocas metamórficas precámbricas

Afloramientos de secuencias de rocas semejantes en litología y edad a las rocas del **Complejo Oaxaqueño** se conocen como el gneis del Novillo en las cercanías de Ciudad Victoria, Tamaulipas y el gneis Huiznopala, en el área de Molango, Hidalgo. En la Mixtequita, en Oaxaca, una continuidad de este tipo de rocas, que Ortega (1995) consideró un microcontinente al que denominó Oaxaquia, resulta muy importante para la reconstrucción de los continentes en ese periodo. Por afinidad faunística de rocas de edad paleozoica que sobreyacen a las rocas del Complejo Oaxaqueño, se sugiere una afinidad con rocas del Escudo Brasileño y no de la Provincia Grenville, como se había supuesto durante mucho tiempo.





### 17.5.2.2 Rocas metamórficas del Paleozoico

#### Complejo Acatlán

Rocas metamórficas de edad paleozoica pre Misisípico corresponden al *Complejo Acatlán*. Este complejo aflora en la parte centro sur del estado de Puebla, norte de Guerrero y noroeste de Oaxaca y se considera el basamento del terreno Mixteco. Este es el único complejo metamórfico donde se diferencian grupos (Grupo Petlalcingo y Grupo Acateco) que pertenecen a dominios tectónicos distintos.

El grupo Petlalcingo está constituido por las Formaciones Cosoltepec, Chazumba y Magdalena, enlistadas de norte a sur. En las dos primeras predominan las filitas y esquistos de moscovita con algunos horizontes de metacaliza; en la segunda aparecen esquistos de biotita y moscovita y en las partes estructurales más bajas, esquistos de biotita con sillimanita. Este evento representa un metamorfismo progresivo de norte a sur que culmina con características de ultrametamorfismo, evidenciadas por la presencia de migmatitas de la formación Magdalena.

El grupo Acateco está constituido por las Formaciones Xayacatlán, Esperanza y Tecomate. La primera está constituida por una secuencia de filitas y esquistos pelíticos con almandino y cloritoide, intercalados en una secuencia de esquistos verdes poli-deformados, serpentinitas y esquistos de talco. Contiene, en diferentes niveles estructurales, nódulos y lentes de metaeclogita y esquistos azules, rocas típicas de ambientes de alta presión. Se le ha atribuido una afinidad de tipo ofiolítico. La Formación Esperanza está formada por una secuencia de ortogneises cuarzo feldespáticos y algunos paragneises pelíticos milonitizados. La Formación Tecomate corresponde a filitas y metacalizas, discordantes a las dos anteriores. Ortega (1981a) considera que esta secuencia de rocas se formó en una antigua zona de subducción y colisión continental, conforme a las rocas que presenta, características de las grandes suturas del planeta.

#### Otros afloramientos de rocas metamórficas paleozoicas

Rocas metamórficas de edad Paleozoico superior afloran en Coahuila (Sierra del Carmen), Tamaulipas el Esquisto Granjeno, constituido por filitas, esquistos verdes y serpentinitas que afloran al norte de Ciudad Victoria; Formación Taray en Zacatecas; Formación Gran Tesoro en Durango; en Teziutlán, Puebla; en la parte meridional del estado de Chiapas, secuencia de rocas que se correlaciona con el grupo Chuacús de Guatemala; y el Complejo Metamórfico Matías Romero del Istmo de Tehuantepec.

### 17.5.2.3 Rocas metamórficas del Mesozoico

#### Complejo Tierra Caliente

Durante el Triásico y Jurásico en el sur de México, en el territorio que ahora corresponde a los estados de Guerrero, México, Michoacán, Colima y Jalisco existía un arco de islas activo que formó una secuencia de rocas vulcano-sedimentarias que fueron afectadas por procesos de metamorfismo en la facies de esquisto verde. De acuerdo con Elías-Herrera (1987), en la parte inferior de la facies de anfibolita, las rocas metasedimentarias corresponden con pizarras, filitas, metacalizas y esquistos calcáreos que presentan, al menos, cuatro periodos de deformación, las cuales alternan con pillow lavas, esquistos verdes de actinolita, metafelsitas, metandesitas y metariolitas. Esta secuencia de rocas es denominada por Ortega (1981a) *Complejo Tierra Caliente*, mientras que otros autores lo denominan *Complejo Ixtapan Teloloapan*, Campa & Coney (1983). El segundo nombre es el más aceptado por la comunidad geológica nacional. Este complejo metamórfico incluye las formaciones Esquisto Taxco, Rocas verdes Taxco Viejo, y Ayotusco.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

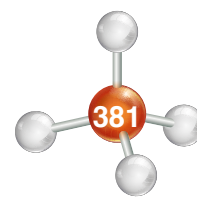
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





## Complejo Xolapa

El *Complejo Xolapa*, es el basamento del terreno Chatino o Terreno Xolapa. Corresponde a una franja de rocas metamórficas en facies de anfibolita con un frente de migmatitas hacia su parte sur. Aflora en una franja que corre paralela a la costa del Pacífico, desde la costa de Guerrero hasta la costa de Oaxaca.

### 17.6 Conclusiones

La química es fundamental para comprender los procesos que ocurren en la Tierra, tanto exógenos, es decir que se llevan a cabo sobre la superficie, como endógenos, aquéllos que suceden en su interior. Estos procesos son responsables de la formación de las rocas.

Los factores que intervienen en la formación de las rocas sedimentarias implican erosión, transporte, depósito, disolución, precipitación química durante la diagénesis y la consecuente neoformación de minerales.

Las rocas ígneas forman asociaciones mineralógicas constituidas al momento de enfriarse el magma que les da origen, tanto si asciende hasta la superficie, como si permanece en el interior.

Las rocas metamórficas y su contenido mineralógico son resultado de las condiciones de presión, temperatura y composición química del ambiente geológico donde se formaron. La Química, entonces, promueve la comprensión de los procesos que originan a las rocas y las leyes que gobiernan su distribución sobre la Tierra.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

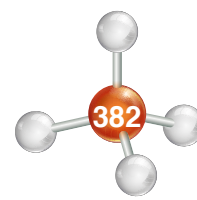
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





# Capítulo 18

## Los explosivos y la Química en la Ingeniería de Minas y Metalurgia

Gabriel Ramírez Figueroa

### 18.1 Introducción

Como estudiante de Ingeniería de Minas y Metalurgia, seguramente tendrás inquietudes relacionadas con la aplicación de la Química en el ejercicio de dicha profesión.

Este capítulo se elaboró con información recopilada de diferentes fuentes bibliográficas y experiencias profesionales.

De forma espontánea, se podría decir que su utilización se encuentra en el segundo nombre de la carrera, es decir, en la Metalurgia.

Sin embargo, la Química posee singular importancia en la minería, sobre todo al momento de, literalmente, desprender las rocas de la Tierra.

De las asignaturas de Geología General y Petrología se sabe que una roca consiste en un agregado de uno o más minerales y que no ostenta una composición química específica (Nance & Murphy, 2016); dichos agregados constituyen la unidad básica de la cual está formada la Tierra.

Los geólogos dividen a las rocas en tres grandes grupos: *ígneas*, formadas cuando la roca fundida, denominada magma, se enfría y se solidifica; *sedimentarias*, cuya materia prima son los sedimentos acumulados en capas sobre la superficie de la Tierra y *metamórficas*, producidas a partir de rocas ígneas, sedimentarias o, incluso, de otras rocas metamórficas.

El significado del término “metamórfico” es literal: cambiar la forma. La mayoría de los cambios tienen lugar a temperaturas y presiones elevadas que se dan en la profundidad de la corteza terrestre y el manto superior. (Tarbuck, et. al, 2005).

La Figura 18.1 muestra un ejemplo de roca.

En efecto, uno de los grandes retos a los que la minería se ha enfrentado tiene que ver con la forma como “tomamos” los materiales sólidos de la madre naturaleza.

#### Sumario

##### 18.1 Introducción

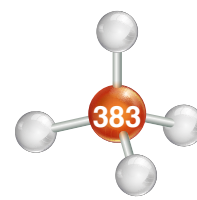
##### 18.2 Origen e historia de los explosivos

##### 18.3 Termoquímica y equilibrio químico

##### 18.4 Conclusiones



Figura 18.1. Gran roca desprendida de un glaciar.







Algunos, como la arena, la grava o el suelo vegetal son bastante nobles y nos permiten desprenderlos con la simple excavación de una pala manual o mecánica (Figura 18.2).

¡Seguramente todos habremos jugado con la arena de la playa alguna vez!

Qué fácil era mover el material de un lado a otro con la mano o con una pequeña pala y un rastrillo de plástico (Figura 18.3).

Otros materiales, los deleznales, por ejemplo, que se rompen o se deshacen fácilmente, como el carbón, la sal o la potasa<sup>4</sup>, requieren de algún mecanismo de corte, roce o rasgado. Puede tratarse de grandes ruedas dentadas que, al girar, van cortando el mineral (Figura 18.4). (Caterpillar, 2016).

Pero ¿qué sucede con las rocas macizas? ¿Cómo desprender o fragmentar una roca dura? (Figura 18.5). Esta pregunta no es reciente. Desde tiempos remotos, los mineros descubrieron que podían hacerlo con fuego y agua o con cuña y marro; quienes realizaban este trabajo fueron llamados “barreteros”.

La gran desventaja de estos métodos antiguos tiene que ver con la productividad. Se requieren grandes cantidades de tiempo y demasiado esfuerzo para obtener tan sólo algunos cuantos materiales fragmentados.



Figura 18.2. Pala o cucharón moviendo material.



Figura 18.3. Niños jugando en la playa.



Figura 18.5. Máquina perforadora neumática modelo S250 marca Boart Longyear.



Figura 18.4. Máquina cortadora de carbón en frente larga

<sup>4</sup> Potasa. Del fr. *potasse*, y este del neerl. *potasschen* ‘cenizas de pote’. 1. f. Quím. Hidróxido potásico sólido, con propiedades deshidratantes y deliquescentes (que absorbe la humedad). (Real Academia Española).



Es por ello que, los investigadores encontraron en la Química, una gran solución a sus problemas: los explosivos.

El proceso no fue sencillo: estuvo plagado de dificultades y peligros. Sin embargo, hoy podemos asegurar que el uso de la química en los explosivos es seguro y de gran utilidad para la minería.

## 18.2 Origen e historia de los explosivos

“Los explosivos comerciales no son otra cosa que una mezcla de sustancias, unas combustibles y otras oxidantes, que, iniciadas debidamente, dan lugar a una reacción exotérmica muy rápida que genera una serie de productos gaseosos a alta temperatura, químicamente más estables y que ocupan un mayor volumen”. (ITGE, 1994).

El origen de los explosivos se remonta a la pólvora negra, producto clasificado como deflagrante, es decir, sustancia que arde súbitamente con llama (reacción termocinética) y sin explosión (RAE, 2016). El consenso entre las diferentes corrientes de estudio es que la pólvora fue inventada en China, distribuida en el Medio Oriente y llevada por los árabes a Europa (DuPont, 1983).

La composición más popular de la pólvora contiene 75% de nitrato de potasio, 15% de carbono y 10% de azufre (porcentajes en masa). Actualmente se utiliza en pirotecnia y como propelente (impulsor) de proyectiles en armas antiguas (Ídem, 1983).

Posteriormente, la nitroglicerina fue descubierta por el químico italiano Ascanio Sobrero en 1847, trabajando en la Universidad de Turin, y en 1867, el químico Alfred Nobel (1833-1896) creó la dinamita al absorber la nitroglicerina en una materia porosa e inerte (como el sílice, el polvo de ladrillo, la arcilla seca, el yeso, el carbón, etc.) (MAXAM, 2017)

La nitroglicerina fue el primer explosivo práctico con mayor potencia que la pólvora negra mientras que la dinamita, al ser un explosivo más estable, sustituyó rápidamente a la nitroglicerina en aplicaciones industriales, en la minería y en la industria bélica (Ídem, 2017). La figura 18.6 esquematiza una caja explosora de cremallera.

Los explosivos se clasifican como sustancias *detonantes*, cuya reacción se autoabastece por una onda de choque que va iniciando al explosivo que aún no se ha detonado.

Dada la alta velocidad de la reacción, estos explosivos son muy potentes. Dentro de la clase de los detonantes se pueden incluir las siguientes subclases: explosivos primarios, secundarios y terciarios, aunque también pueden ser clasificados como: a) iniciadores o detonadores, b) de carga o masa y c) multiplicadores. En todos estos casos se presentan reacciones en cadena diseñados como parte de una voladura, de modo tal que el explosivo vaya detonando gradualmente, a una velocidad supersónica, hasta lograr su objetivo final (Wikipedia, 2016).

La potencia de los explosivos modernos se mide en kilocalorías por kilogramo (kcal/kg) que no es otra cosa que el calor de la explosión.

Uno de los explosivos de mayor uso en la minería (de tipo terciario y/o de carga) es el ANFO, (acrónimo del inglés Ammonium Nitrate - Fuel Oil). Consiste en una mezcla de nitrato de amonio y un combustible de bajo costo derivado del petróleo (la traducción directa de “fuel oil” en español

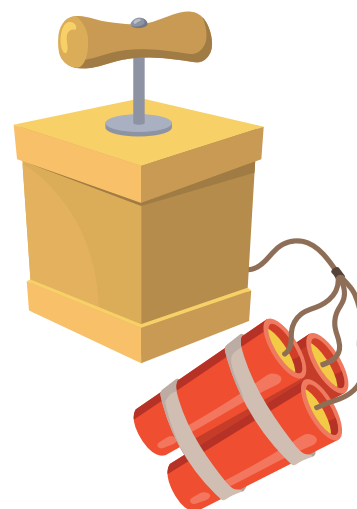
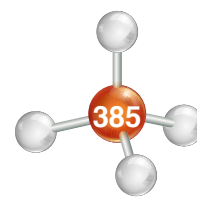


Figura 18.6. Esquematización caricaturesca de una caja explosora de cremallera y dinamita.







es “diesel”). El ANFO es una mezcla muy segura y barata cuyos componentes se pueden adquirir con mucha facilidad. En la Figura 18.7 se aprecian las cajas modernas de detonación.

Si bien existen otros explosivos, como los hidrogeles y las emulsiones, en este capítulo se hablará sólo del ANFO, como un ejemplo representativo.

### 18.3 Termoquímica y equilibrio químico

El calor es una manifestación de la energía, intrínsecamente ligada con las leyes de la Termodinámica, la entalpía de un sistema y la capacidad calorífica.

Sabiendo lo anterior, se evoluciona a la Termoquímica, rama de la físicoquímica que aborda los cambios térmicos asociados a las transformaciones químicas y físicas de la materia, en las que las unidades de energía son la caloría, el julio y la kilocaloría (equivalente a 1000 calorías) (Maron & Prutton, 1993).

Manejar con propiedad estos conceptos tiene relevancia, puesto que, en el diseño de una voladura, el balance de oxígeno de los explosivos puede ser cubierto con base en sus propiedades fisicoquímicas.

Durante una explosión, la reacción química produce una zona de detonación que se propaga a través de la carga explosiva, así como hacia la roca circundante (Hartman, 2002).

La mayor parte de un explosivo está constituida por oxígeno, nitrógeno, hidrógeno y carbón, junto con algunos elementos metálicos como el aluminio, magnesio, sodio y calcio. (Ídem, 2002).

Considerando que la reacción debe oxidar todos los combustibles en él contenidos, el balance de oxígeno resulta vital: la mezcla debe contener suficiente oxígeno para completar la reacción, pero no tanto como para reaccionar con el nitrógeno (Clark, 1968).

Con un balance “cero” de oxígeno, los productos teóricos de la detonación, todos en forma gaseosa e inofensiva, son el agua, el dióxido de carbono y el nitrógeno. De hecho, también son generados otros gases, en pequeñas cantidades: óxidos de nitrógeno, monóxido de carbono, metano y otros. Cualquier desviación en el balance de oxígeno produce una mayor cantidad de estos gases tóxicos e indeseables.

La formación de estos gases, por ser endotérmicos, es decir, que absorben calor, provoca ineficiencias puesto que consumen energía en lugar de liberarla (Dick et al., 1983).

De acuerdo con Hartman (2002), una reacción balanceada que sólo involucre el oxígeno, hidrógeno y carbón puede escribirse de la siguiente manera:

$$\text{Balance de oxígeno} = O_0 - 2CO_2 - H_2O = 0$$

En caso de que algún metal o cualquier otro material reactivo se encuentre presente al calcular el balance, se debe contar con suficiente oxígeno para formar los óxidos de dichos elementos (por ejemplo,  $Al_2O_3$ ,  $MgO$ ,  $Na_2O$ ,  $CaO$ )



Figura 18.7. Modernas cajas para iniciar la detonación de los explosivos.



En el caso del ANFO, la detonación de tres mezclas con diferentes proporciones se presenta de la tabla 18.1.

En cada caso, la energía liberada se obtiene al calcular la diferencia entre los calores de formación, tanto de los ingredientes como de los productos. Las consecuencias del balance de oxígeno son evidentes: se forman diferentes productos y cantidades, aunque el mayor impacto se observa en la reducción de la energía liberada. En la industria minera, la mezcla que generalmente se utiliza es de 94% de nitrato de amonio y 6% de diesel, con lo que se asegura un ligero exceso de combustible que provoca un pequeño desbalance en el oxígeno como medida de seguridad (los óxidos nitrosos son más tóxicos que el monóxido de carbono) y el sacrificio energético es bajo (Hartman, 2002).

<p>a) 94.5% AN – 5.5% FO (formulación balanceada)</p> $3\text{NH}_4\text{NO}_3 + \text{CH}_2 \rightarrow 7\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2 + 3\text{N}_2 + 930 \text{ kcal/kg}$
<p>b) 92.0% AN – 8.0% FO (formulación con exceso de combustible)</p> $2\text{NH}_4\text{NO}_3 + \text{CH}_2 \rightarrow 5\text{H}_2\text{O} + \text{CO} + 2\text{N}_2 + 810 \text{ kcal/kg}$
<p>c) 96.6% AN – 3.4% FO (formulación con déficit de combustible)</p> $5\text{NH}_4\text{NO}_3 + \text{CH}_2 \rightarrow 11\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2 + 4\text{N}_2 + 2\text{NO} + 600 \text{ kcal/kg}$ <p style="text-align: right;">(Hartman, 2002)</p> <p>¿Cuál de estas tres mezclas es la que debe elegirse a), b) o c)?</p>

Tabla 18.1. Mezclas y sus proporciones para realizar detonación.

## 18.4 Conclusiones

Como habrá podido observarse, la Ingeniería de Minas y Metalurgia es una disciplina de la ingeniería que requiere de un cúmulo de conocimientos para extraer eficaz y eficientemente los minerales que requiere la sociedad. Desde el conocimiento de las rocas a partir del estudio de la Geología Física y la Petrología, hasta el diseño de una operación minera el profesional acude a las matemáticas, a la física, a la geología, a las ciencias de la ingeniería y a la ingeniería aplicada y, en el caso que nos ocupa, a la química.

La información aquí contenida también es de utilidad porque engloba una característica adicional que todo ingeniero debe poseer: el de la alta productividad, como se muestra en la Figura 18.8, con el uso de grandes equipos y de alto desempeño.

Las cuotas de producción diaria deben ser cubiertas con la debida calidad del mineral extraído, con la adecuada seguridad tanto del personal como de la mina, en forma sustentable y con eficiencia operativa.



Figura 18.8. Carga moderna y de alta productividad de explosivos.



Aunque no es el único factor que interviene en el proceso, una mezcla balanceada en oxígeno garantiza que la energía liberada para fracturar y desprender las rocas se verá beneficiada. Con ello, el ingeniero podrá entregar un mayor avance en metros lineales, si se trata de obras de desarrollo o un mayor volumen en toneladas, en el caso de obras de producción. La Figura 18.9 ejemplifica un banco de producción de una mina a cielo abierto.



Figura 18.9. Voladura en un tajo a cielo abierto.





# Capítulo 19

## Métodos Geofísicos y la Química de la Tierra

Iza Canales García, Isabel Domínguez Trejo, Antonio de Jesús Mendoza Martínez

### 19.1 Introducción

La Geofísica orienta sus estudios hacia la utilización de las propiedades físicas de los cuerpos de roca que constituyen la corteza terrestre. El análisis y la interpretación de dichas propiedades proveen imágenes y datos que permiten inferir estructuras geológicas, modelos estratigráficos y distribución de propiedades petrofísicas. Los estudios geofísicos son imprescindibles en cualquier trabajo de exploración de recursos naturales, sobre todo, de aquellos que no están al alcance de las técnicas geológicas convencionales, debido a su profundidad.

Los materiales que componen a las rocas responden a diferentes impulsos físicos; gracias a ello, la ingeniería geofísica puede hacer incidir de manera artificial algunas señales sobre el terreno o puede utilizar campos naturales para llevar a cabo sus mediciones. A partir de estas consideraciones es posible clasificar los métodos geofísicos en *métodos potenciales*, que son los que abordan las propiedades de las rocas asociadas a su densidad y a sus características magnéticas; y en *métodos indirectos*, que utilizan campos inducidos, asociados a la elasticidad de los materiales, a su respuesta ante estímulos eléctricos o a sus propiedades sónicas.

En este apartado se describirán algunas de las técnicas geofísicas más utilizadas en la industria de la exploración de recursos naturales, sus principales objetivos y los resultados que se pueden obtener al analizar los datos recabados.

### 19.2 Métodos potenciales

Los métodos potenciales comprenden las técnicas que emplean campos naturales en el estudio del subsuelo (propiedades asociadas a densidad y características magnéticas) para llevar a cabo mediciones mediante perfiles o mallas de datos.

#### 19.2.1 Gravimetría

Desde la antigüedad el ser humano se percató de la gravedad terrestre. Grandes pensadores se dieron a la tarea de explicar los fenómenos que observaban, entre ellos se pueden citar a **Galileo Galilei (1564-1642)** y **Kepler (1571-1630)**. Sin embargo, **Isaac Newton (1642-1727)** fue quien logró expresar matemáticamente sus hallazgos. Estableció que la fuerza de atracción es directamente proporcional a la masa de los cuerpos e inversamente proporcional al cuadrado de la distancia entre ellos.

$$F = K \frac{m_1 m_2}{d^2} \quad \text{Donde: } K = \text{constante}$$

La Figura 19.1 ilustra las fuerzas de atracción entre dos cuerpos.

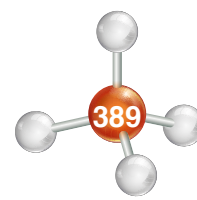
#### Sumario

##### 19.1 Introducción

##### 19.2 Métodos potenciales

##### 19.3 Métodos indirectos

##### 19.4 Conclusiones





Con este fundamento en la actualidad se han realizado mediciones precisas para conocer el valor de K y la ecuación general de la gravedad.

De acuerdo con la segunda ley de Newton, la fuerza de gravitación produce una aceleración en los cuerpos  $F = m \cdot a$ . Esta aceleración es diferente en los dos cuerpos a pesar de que la fuerza de gravitación que actúa en ellos es la misma.

En nuestro planeta encontramos un caso particular de la gravitación, llamado *gravedad*, de gran importancia para la vida y el estudio del planeta. La atracción gravitacional (Figura 19.2) que ejerce la masa de la Tierra sobre los cuerpos en la superficie, se define con la siguiente ecuación:

$$G = K \frac{M_T m}{R^2}$$

Donde:

$M_T$  = Masa de la Tierra

$m$  = Masa de un cuerpo

$R$  = Radio promedio

$K$  = Constante

La aceleración que la masa de la Tierra produce en los cuerpos es conocida como *aceleración de la gravedad*, de modo que:

$$g = K \frac{m}{R^2} \quad g = 981 \frac{cm}{seg^2} = 981 \text{ gales}$$

Con estas premisas es como se han desarrollado instrumentos para la prospección. El *gravímetro* (Figura 19.3) es el instrumento utilizado para realizar las mediciones. Está basado en el principio del dinamómetro y lo compone una masa suspendida de un resorte, el cual es deformado por la fuerza de la masa en cuestión. En condiciones de equilibrio dinámico el resorte oscila alrededor de la posición del equilibrio estático debido a la fuerza de gravedad. Existe una amplia gama de gravímetros, desde los más simples hasta los más sofisticados y complejos.

Para llevar a cabo los trabajos de prospección gravimétrica es necesario cumplir con varias etapas, como en todos los proyectos de ingeniería: primeramente, se debe realizar una planeación delimitando los objetivos y estableciendo el procedimiento que habrá de aplicarse. Luego efectuar el muestreo en campo, organizar los datos y hacer las correcciones necesarias, posteriormente se realiza la interpretación preliminar y, finalmente, integrar, interpretar y evaluar los resultados.

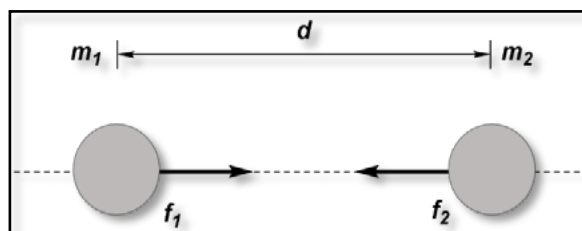


Figura 19.1 Fuerza de atracción entre los cuerpos.

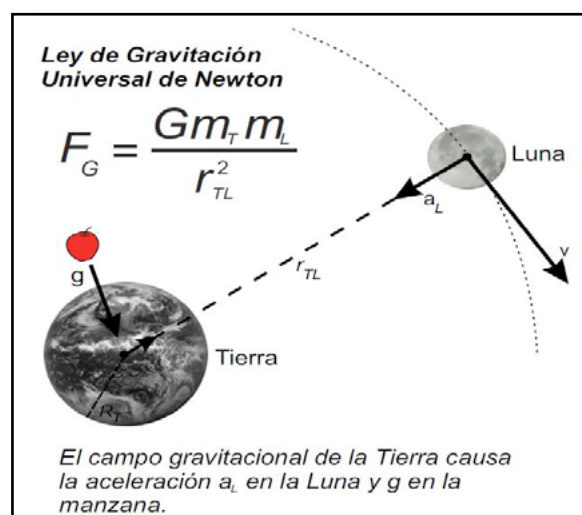


Figura 19.2. Ley de Gravitación Universal (Tomado de [www.cienciaonline.com/2012/04/18](http://www.cienciaonline.com/2012/04/18)).



Figura 19.3. Toma de datos con gravímetro. Modelo CG-5 AUTOGRAV.



El gravímetro puede medir diferencias muy finas en la gravedad, entonces, grandes cuerpos mineralizados pueden aumentar la gravitación en regiones específicas en virtud de las propiedades físicas de las rocas.

Las anomalías gravimétricas (Figura 19.4) son las variaciones de los valores medidos, respecto a la gravedad normal como campo potencial natural de la Tierra.

La gravimetría tiene aplicaciones en la búsqueda de materiales que ostentan contrastes de densidad con el medio que los circunda. Por ejemplo, los depósitos minerales.

En la Figura 19.5 se muestra el principio físico del gravímetro, así como la aplicación en la prospección de recursos naturales.

Figura 19.5. Prospección gravimétrica y principio de un gravímetro (Modificado de Griem, 2016).

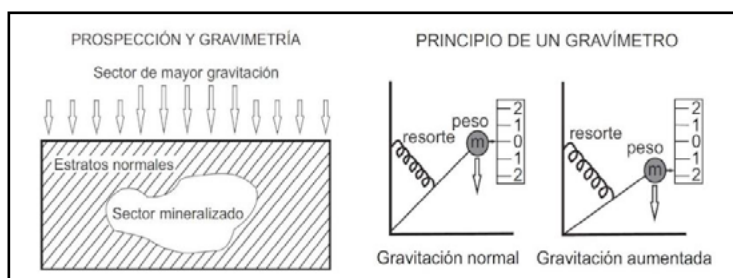


Figura 19.4. Anomalia gravimétrica (Tomada de [www.interempresas.net](http://www.interempresas.net)).

### 19.2.2 Magnetometría

La **magnetometría**, al igual que la gravimetría, se sirve de los campos potenciales naturales de la Tierra. Este método geofísico utiliza el campo magnético que afecta a los yacimientos que contienen magnetita, donde los depósitos generan un campo magnético inducido secundario (Figura 19.6).

La Tierra (Figura 19.7) actúa como un dipolo generador de un campo magnético. El dipolo está orientado hacia el sur, por lo que en el hemisferio Norte geográfico se ubica el polo Sur

magnético y viceversa. La fuerza entre dos polos magnéticos se expresa mediante la ley de Coulomb:

$$F = K \frac{PP'}{\mu L^2}$$

Donde:

P y P' = Cargas magnéticas,  
 $\mu$  = Permeabilidad magnética,  
 L = Distancia entre las cargas

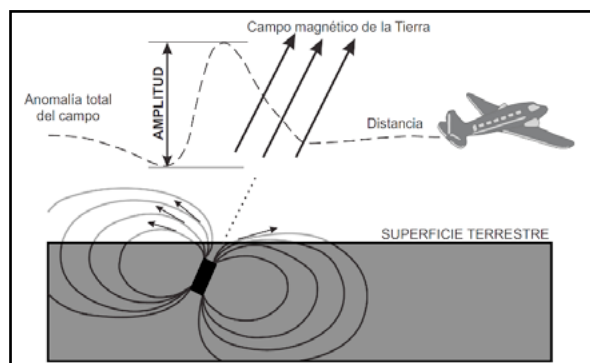


Figura 19.6. Prospección electromagnética (Modificado de GreenVia, 2013).

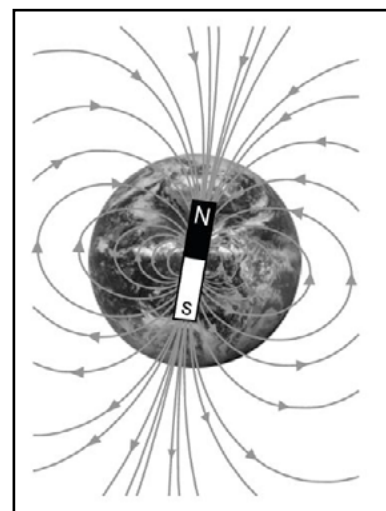


Figura 19.7. Campo magnético natural de la Tierra (Tomado de [www.objetomag.50webs.com/campos.html](http://www.objetomag.50webs.com/campos.html)).



Si las cargas son de polaridad contraria, la fuerza es de atracción y si las cargas son de la misma polaridad, la fuerza es de repulsión.

El campo magnético es el espacio alrededor del imán (Figura 19.8), en el cual se siente su fuerza. La potencia de un campo magnético es un punto medido en dinas que actúa sobre la unidad de polo magnético colocada en ese punto, precisamente.

La intensidad de campo (H) es el Oersted, en un punto, a la distancia L de un polo aislado de potencia P, en una región de permeabilidad  $\mu$ :

$$H = \frac{P}{\mu L^2}$$

Comúnmente el campo es representado por líneas imaginarias, las cuales indican la dirección e intensidad. Si se tiene un medio permeable  $\mu$  y una intensidad de campo de 1 Oersted, la representación será de  $\mu$  líneas por  $cm^2$ . El número total de líneas en el medio es conocido como *flujo magnético*.

El número de líneas que pasan perpendicularmente a través de la superficie es conocido como *inducción magnética* o *densidad de flujo*, medido en Maxwells. Si un cuerpo magnetizable es puesto en un campo magnético adquiere magnetización proporcional al campo. Este fenómeno es conocido como *susceptibilidad magnética*:

$$I = kH$$

La *imantación inducida* depende de la susceptibilidad magnética de una roca o mineral y del campo externo, mientras que la *imantación remanente* de una roca está referida al magnetismo residual de la roca sin un campo externo.

Todas las rocas poseen propiedades magnéticas, aunque algunos materiales se oponen al flujo. Si tienen una orientación perpendicular a las líneas de flujo, son conocidos como *materiales diamagnéticos*, mientras que si atraen a las líneas de flujo y se orientan en el mismo sentido se denominan *paramagnéticos*. Los *ferromagnéticos* atraen los campos magnéticos con mucha intensidad. El hierro y el níquel son ejemplos de estos materiales.

Ratificando que la susceptibilidad magnética en las rocas depende del contenido de magnetita, los diferentes tipos de rocas tiene un comportamiento en función a su origen:

- Rocas sedimentarias – diamagnéticas
- Rocas metamórficas – paramagnéticas
- Rocas ígneas – ferromagnéticas

El *magnetómetro* (Figura 19.9), mide las anomalías magnéticas en la superficie. Existen diferentes equipos, así como diversos métodos de medición, algunos basados en principios mecánicos, como el magnetómetro de Schmidt, el magnetómetro de torsión o la brújula de inclinación y la superbrújula de Hotchkiss.

Para las operaciones en campo es necesario medir la distancia entre estaciones y líneas de observación. La distancia entre las líneas de observación dependerá de la extensión y forma de la

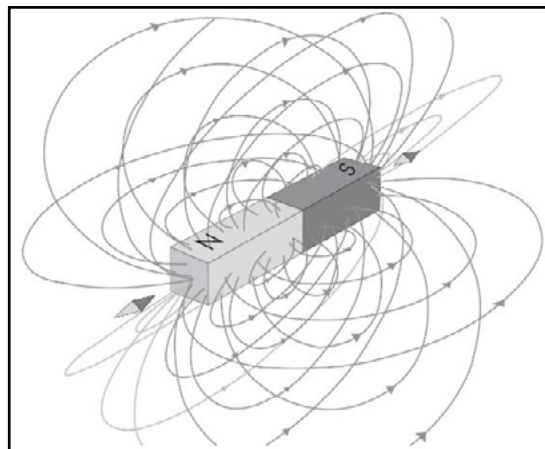


Figura 19.8. Líneas de campo magnético de un imán.





anomalía que presenten los objetivos explorados. Los estudios pueden ser terrestres, aéreos y marinos.



Figura 19.9. Magnetómetro usado en la prospección.

La magnetometría se aplica en la exploración minera, petrolera y en arqueología, así como en la búsqueda de agua en el subsuelo. En prospecciones mineras se emplea directamente en la exploración de minerales magnéticos o de algún mineral no magnético que esté asociado con ellos, mientras que en la industria petrolera el método brinda información sobre la profundidad de las rocas en el basamento y caracteriza las cuencas para, posteriormente, indagar sobre la existencia de yacimientos.

### 19.3 Métodos indirectos

Los métodos indirectos comprenden las técnicas que hacen incidir de manera artificial algunas señales sobre el terreno y utilizan la energía de los campos potenciales, midiendo los datos arrojados por los campos simulados. Las señales se pueden inducir mediante impactos en el suelo o aplicando una corriente eléctrica en el subsuelo.

#### 19.3.1 Método sísmico

La *sismología* estudia el origen y propagación de los movimientos ondulatorios en la corteza terrestre. Cuando se produce un sismo, las rocas de la corteza se mueven propagando las ondas en todas direcciones alejándose del foco. Estas perturbaciones se propagan a diferentes velocidades dependiendo de las propiedades elásticas del material que encuentren. Las ondas precursoras viajan por el interior de la Tierra, mientras que las ondas largas se propagan en la superficie. Las ondas P llegan primero a un punto en la superficie y posteriormente las ondas S, debido a su mayor velocidad de transmisión (Figura 19.10).

Para la aplicación del método es necesario generar la energía que se propagará por el medio. La prospección sismológica provoca un sismo artificial mediante dispositivos que controlan la energía. Para generar la energía sísmica es necesario producir un impacto en el suelo mediante sistemas de explosivos como dinamita, cargas dirigidas o cordones

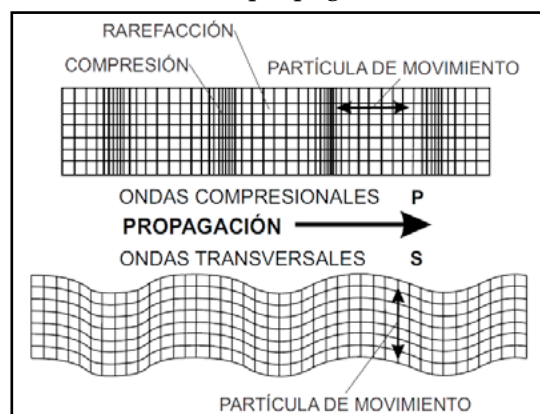


Figura 19.10. Ondas S y P (Tomada de [www.lpi.tel.uva.es/~nachofdocencia/ing\\_ond\\_1/trabajos\\_06\\_07/io3/public\\_html/Ondas/Ondas.html](http://www.lpi.tel.uva.es/~nachofdocencia/ing_ond_1/trabajos_06_07/io3/public_html/Ondas/Ondas.html)).





explosivos, accionados mediante procesos térmicos o de presión, aunque también es posible inducirla con un sistema mecánico: caída de pesas, explosiones de gases confinados, cañones neumáticos y vibradores.

Las operaciones en campo identifican en el terreno la posición de los impactos y la detección de los movimientos que regresan a la superficie después de su propagación en el subsuelo por medio de ondas reflejadas. Dependiendo del objetivo que persiga en la prospección, se debe diseñar un procedimiento para cada caso. Los registros de las señales sísmicas permiten cuantificar el tiempo de llegada de las ondas el cual depende de la distancia del punto donde se realizó el impacto y la profundidad, factores que afectan la velocidad.

Pertencen a este grupo de métodos de la geofísica aplicada los de *refracción* y los de *reflexión sísmica*. Con éstos se mide el tiempo de propagación de las ondas elásticas, transcurrido entre el momento en que se generan las ondas sísmicas y su llegada a diferentes puntos de observación. Para que esto sea posible, se debe disponer de una serie de sensores en línea recta a distancias conocidas, formando un *tendido sísmico* o *línea de refracción* o *reflexión sísmica*. A una distancia conocida del extremo del tendido, en el punto de disparo, las ondas sísmicas son generadas con la ayuda de un martillo o por la detonación de explosivos: las vibraciones en el terreno son detectadas por cada uno de los sensores.

El equipo básico incluye los citados sensores, la unidad de adquisición (la cual almacena los movimientos del terreno detectados por cada sensor), los cables de conexión entre los sensores y la unidad de adquisición y el cable del trigger (encargado de marcar el momento de inicio de registro en la unidad de adquisición) (Figura 19.11 y 19.12).

Los registros de cada sensor contienen información de los movimientos del terreno en función del tiempo y son denominados *sismogramas*, los cuales son analizados en la refracción sísmica para obtener el tiempo de llegada de las primeras ondas a cada sensor desde el punto de disparo, y en la reflexión para obtener información de las ondas que son reflejadas en las diferentes interfaces de suelo. Siempre debe de ser estudiado el sismograma completo.

El método de refracción fue utilizado inicialmente en los descubrimientos de las discontinuidades de Corteza-Manto y de Manto-Núcleo, es decir, las de Mohorovičić y de Gutenberg. Su aplicación exitosa en la prospección petrolera comenzó durante los primeros años de la década de 1920. De este método se debe agregar que describe la forma cómo se propagan las ondas en una superficie homogénea: un frente de onda semiesférico alcanza geófonos igualmente espaciados, que registran el movimiento del suelo debido al arribo de las ondas. El tiempo de viaje de estas ondas entre la fuente de energía, punto de disparo o perturbación y cada uno de los geófonos puede ser determinado en los sismogramas de campo. Con estos datos se puede construir una gráfica que se llama *dromocronas* o *curvas de tiempo de viaje*.

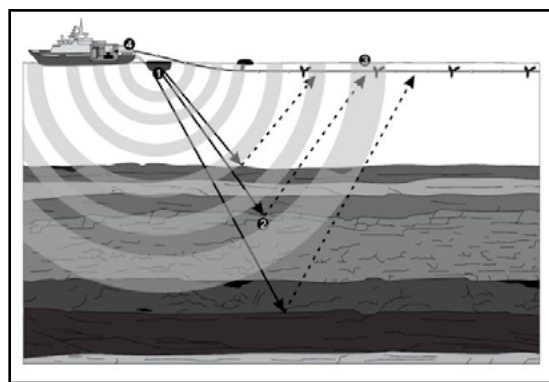
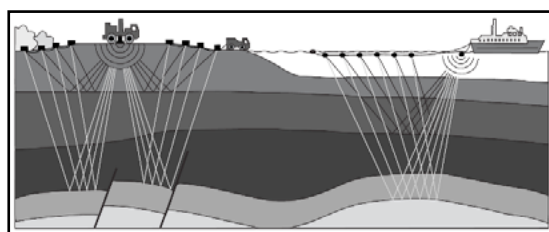


Figura 19.11. Método sísmico (Tomada de <https://ingenierosgeofisicos.blogspot.com/2016/06/en-que-consiste-la-reflexion-sismica.html>).



Figuras 19.12. Prospección sísmica en mar y tierra (Modificado de [notasdegeodesia.blogspot.com/2009/08/metodo-de-reflexion-sismica.html](https://notasdegeodesia.blogspot.com/2009/08/metodo-de-reflexion-sismica.html)).



Las ondas reflejadas también se comenzaron a analizar en la década de 1920, aunque fueron utilizadas, principalmente, para detectar domos salinos o contactos de arcilla-caliza. En la década siguiente, este método desplazó al de refracción en la exploración petrolera, por las siguientes razones:

- 1) El problema de la capa oculta que llega a ser crítico en las secuencias geológicas encontradas en la exploración petrolera.
- 2) La longitud del tendido de cables con geófonos, que oscila entre tres y cuatro veces la profundidad investigada.
- 3) La fuente de energía necesaria para lograr una buena señal a grandes distancias.

### 19.3.2 Método eléctrico

Estos métodos utilizan la medición en campos eléctricos o electromagnéticos para investigar las características estructurales, yacimientos minerales y condiciones del subsuelo. Utilizan la energía de los campos potenciales y pueden medir los datos arrojados por campos generados artificialmente. Las corrientes eléctricas constituyen un sistema de cargas móviles. Aunque los campos eléctricos pueden variar dependiendo de influencias circunstanciales, son muy utilizados en las prospecciones geofísicas.

Los métodos eléctricos están basados en tres propiedades identificadas en las rocas: resistividad, constante dieléctrica y actividad electroquímica en el terreno. Conforme a la corriente eléctrica pueden ser clasificados en:

- Corrientes electrónicas
- Corrientes electrolíticas
- Propiedades dieléctricas

También pueden ser ordenados en función de la frecuencia de las corrientes, sin embargo, comúnmente son organizados de acuerdo con el tipo de campo utilizado. Estos pueden ser *campos naturales* (campo constante y campo variable) o *campos artificiales* (potencial del campo y campos electromagnéticos o por energía primaria inducida).

Un cuerpo que se mueve de un lugar a otro adquiere una propiedad nueva. El trabajo que se realiza al separar dos partes de un sistema que se atraen ejerce una energía potencial que puede ser recuperada de acuerdo con el principio de conservación de la energía. En los campos eléctricos, al separar una carga eléctrica positiva de una negativa, se realiza un trabajo también. Si éstas cargas se acercan, se recupera la energía.

El potencial en un punto del campo eléctrico es la relación de la energía potencial de una carga de prueba colocada en el valor de la carga. Su distribución es representada por medio de superficies equipotenciales (Figura 19.13), perpendiculares a las líneas de corriente. La intensidad de corriente es la carga total positiva que pasa por unidad de tiempo y es medida en Amperios.

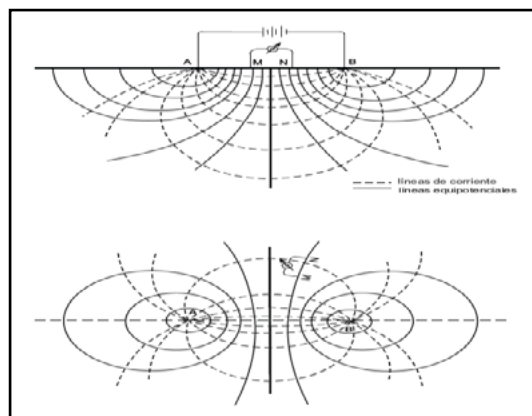


Figura 19.13. Líneas equipotenciales aplicando el método eléctrico (Modificado de [www.medellin.unal.edu.com/~rrodriguez/geologia/electricas.htm](http://www.medellin.unal.edu.com/~rrodriguez/geologia/electricas.htm)).



El flujo de corriente considera un conjunto de capas de resistividades iguales dentro de cada una de ellas y distintas entre sí, superpuestas y separadas en planos paralelos.

La ley de Ohm:

$$R = \frac{\Delta V}{I}$$

Donde:

A= Área

La resistencia se mide en Ohms.

$$\text{Resistividad } \rho = \frac{RA}{L} \quad L= \text{Distancia entre superficies}$$

Cuando la corriente se aplica al suelo conductivamente por medio de electrodos, las variaciones en la conductividad del subsuelo alteran el flujo de corriente en el interior, lo cual representa una variación de la distribución del potencial eléctrico. Esta alteración dependerá del tamaño, de la forma, localización y resistividad eléctrica de los cuerpos del subsuelo (Figura 19.14). En la mayoría de las rocas la conducción eléctrica es electrolítica.

La resistividad será función de su contenido de electrólitos y proporcional a la porosidad y saturación. Gran cantidad de los minerales contenidos en las rocas son aislantes, debido a esto la electricidad fluye por el electrólito en el medio poroso.

Los procedimientos para realizar las mediciones de resistividad, de acuerdo con el objetivo, son: *medición de resistividad a profundidad constante* y *medición de la resistividad a diferentes profundidades en un mismo punto*.

Su aplicación ocurre en casos donde las características de las formaciones geológicas son constantes dentro de la misma formación y contrasten con otras formaciones. La salinidad de los líquidos contenidos en las formaciones hace que la resistividad depende de ello. Una gran aplicación de este método sucede en la ingeniería civil pues permite definir las condiciones del suelo para diferentes fines como construir infraestructura, tuberías, líneas de ferrocarril, subestaciones eléctricas, etc.

### 19.3.3 Método electromagnético

Con este método se obtiene información similar a la de los métodos eléctricos. Son empleados cuando las condiciones del campo no permiten llevar a cabo una prospección eléctrica, pues no requieren contacto con el terreno que se desea caracterizar. Las técnicas resultan muy simples y fáciles de adaptar para realizar los levantamientos.

Aprovechan las propiedades eléctricas o electromagnéticas del terreno mismo, aplicando las siguientes leyes de la física: ley de Faraday y ley de Ampere.

La ley de Faraday establece que se produce un voltaje eléctrico siempre que exista un campo magnético variable en el tiempo.

$$E = -N \frac{\partial \Phi}{\partial t}$$

Donde:

E=Fuerza electromotriz (volt)

N=Número de vueltas

Φ= Campo magnético (weber)

t= Tiempo (segundo)

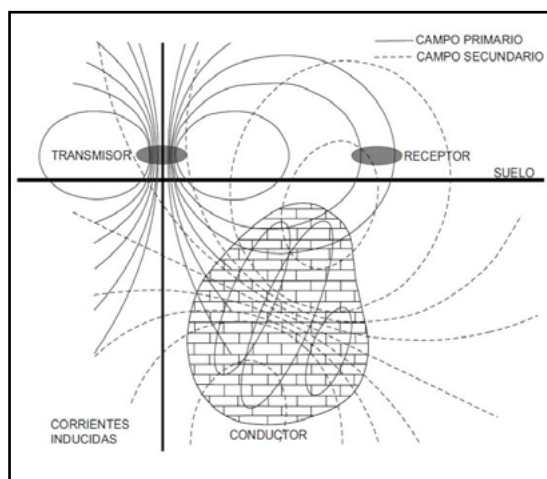


Figura 19.14. Detección de cuerpo en el subsuelo (Modificado de Reynolds, 1997)



Por su parte, la ley de Ampere establece que un campo magnético es producido por una corriente eléctrica.

Los sistemas electromagnéticos son clasificados según la geometría de las bobinas y la movilidad del sistema. Existen infinidad de configuraciones de campos diferentes, posible objeto de una prospección. Tienen la ventaja de completar la medición a pesar de que en la zona existan materiales muy resistivos al flujo de la electricidad o, incluso, muy conductivos, sin necesidad de ocupar electrodos (Figura 19.15). El campo magnético variable se emplea en el dominio de las frecuencias, cuando la señal se realiza de acuerdo con un número discreto de frecuencias, precisamente. En el dominio del tiempo, este análisis se realiza en un intervalo específico.

Los métodos electromagnéticos actualmente son empleados en estudios ambientales. Todos miden la conductividad eléctrica de los materiales de subsuelo, pues el rango en que ésta varía es muy amplio. Son especialmente útiles en la exploración de acuíferos, cartografía de contaminantes industriales, medición de la salinidad, detección de la interfase de agua dulce y salada y localización de fracturas.

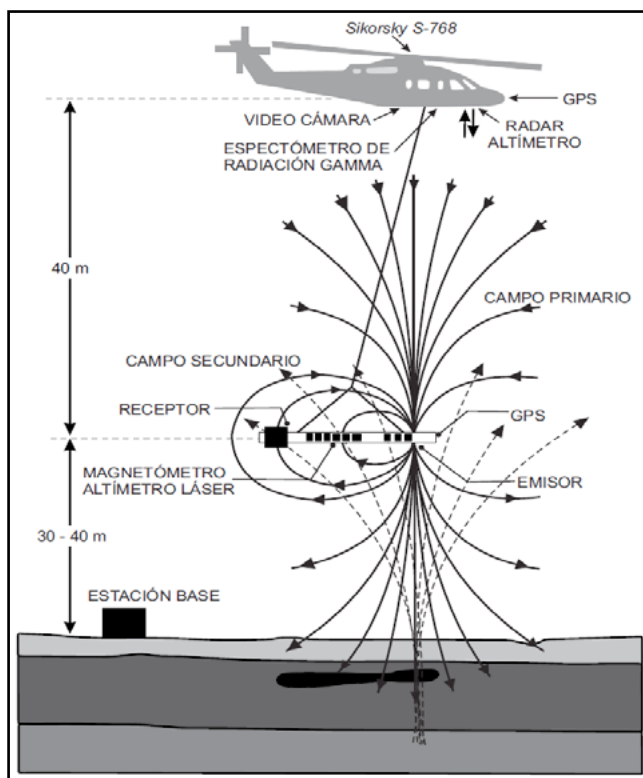


Figura 19.15. Prospección electromagnética (Tomado de <https://www.interempresas.net/Portada/Articulos-/135030-Aplicación-de-los-drones-a-la-prospección-y-explotación-de-recursos-minerales.html>).

## 19.4 Conclusiones

Existe una estrecha relación entre estas disciplinas a lo largo de toda la cadena de valor en la prospección de recursos naturales. Gracias a la química, que es la rama de la ciencia que trata sobre la constitución y propiedades, así como de la transformación de la materia que brinda estructura a los cuerpos, a los principios físicos en que se sustentan los métodos de exploración geofísica y al medio en que interactúan al momento de realizar las mediciones, se logra explorar el subsuelo.

Es posible, por ejemplo: determinar la localización geográfica de un cuerpo, ubicar las estructuras que lo conforman, caracterizar las propiedades físicas y químicas que lo definen (como dimensiones y composición), obtener datos que habrán de ser interpretados y analizados para calcular y evaluar factores de interés económico y social, predecir su comportamiento en el tiempo y anticipar la rentabilidad de un proyecto.

Los estudios geofísicos, con el auxilio de otras disciplinas afines, serán los que revelen absolutamente toda la información acerca de las rocas que constituyen la corteza terrestre. Sin embargo, siempre serán los elementos de la materia los que otorguen el conocimiento fundamental de su composición para desarrollar las investigaciones científicas proyectadas.





Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

En el momento en que se realiza una prospección, los cuerpos en el subsuelo están conformados por diferentes elementos que los caracterizan y diferencian entre sí. Estas diferentes composiciones en la roca provocan anomalías que son detectadas con los dispositivos empleados, dependiendo del método aplicado.

Cuando se detectan anomalías en un campo potencial natural de la Tierra, éste se ve modificado en el área de prospección. Las rocas mineralizadas afectan los campos de gravedad y magnético debido a las diferentes densidades y cantidad de magnetita que poseen, respectivamente.

Con la ayuda de las herramientas geofísicas, en el momento de inducir corrientes eléctricas o durante la propagación de ondas sísmicas, se conocen los fluidos que saturan el medio poroso obteniendo parámetros que permiten caracterizar al sistema y reconocer las características plásticas de las rocas. Estos procesos revelan imágenes del subsuelo que, posteriormente, serán interpretadas para identificar un posible cuerpo con el potencial de un recurso que debe ser explotado.





# Capítulo 20

## La Química y recuperación de hidrocarburos

Javier Arellano Gil, Ana Laura Pérez Martínez, Alan Sebastian Rivera Rodríguez, Mariel Brito Schulz, Paolo Gabriel Páez Orozco, Brenda Ramírez Terrones

### 20.1 Introducción

Para explotar los hidrocarburos de un yacimiento petrolero se pueden emplear diversas *técnicas de recuperación: primaria, secundaria, mejorada y avanzada*. En la primera se utiliza la energía natural del yacimiento y en las tres siguientes se restaura artificialmente la presión, dentro de la formación, para mejorar el desplazamiento de los fluidos desde el yacimiento hacia los pozos de producción.

Tras la intensa actividad extractiva, durante más de 100 años, muchos campos de México y del mundo se encuentran abandonados o en su etapa madura. En los últimos, la producción se encuentra en declive. No obstante, contienen hidrocarburos remanentes que

pueden ser recuperados implementando técnicas de recuperación mejorada o avanzada. Esta acción es necesaria para cubrir la creciente demanda mundial de energía, la cual proviene, mayoritariamente, de los hidrocarburos. Se debe considerar que los nuevos descubrimientos son escasos y las fuentes alternativas de energía no son suficientes aún para satisfacerla.

En las cuencas petroleras de México, la mayoría de los campos se encuentran en etapas avanzadas de su vida productiva, ya que contabilizan más de treinta años de producción; sus remanentes, sin embargo, siguen siendo importantes y requieren de un tipo de extracción más especializada, que asegure también la rentabilidad financiera del proyecto.

Los métodos de recuperación mejorada consisten en la aplicación de sustancias de diversa composición química que, generalmente, no se encuentran en el yacimiento. Son inyectados en condiciones específicas para alterar el comportamiento fisicoquímico de los fluidos y permitir la extracción de hidrocarburos residuales. En este caso los métodos convencionales no son una opción financieramente válida.

El conocimiento de la química es fundamental en la recuperación de hidrocarburos. En primer lugar, porque garantiza el conocimiento de la composición de éstos y la de otros fluidos contenidos en el yacimiento; segundo, porque permite identificar sus propiedades y características peculiares; en tercer lugar, porque explica la relación que establece con las diferentes rocas almacenadoras, las cuales poseen una composición química distintiva, y en cuarto lugar, porque permite decidir qué sustancias químicas deben ser utilizadas en la recuperación mejorada y avanzada.

#### Sumario

##### 20.1 Introducción

##### 20.2 Tipos de recuperación

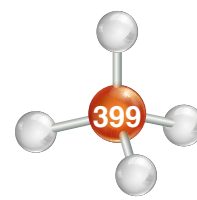
##### 20.2.1 Recuperación primaria

##### 20.2.2 Recuperación secundaria

##### 20.2.3 Recuperación mejorada

##### 20.2.4 Recuperación avanzada

##### 20.3 Conclusiones





## 20.2 Tipos de recuperación

La recuperación de hidrocarburos inicia, obviamente, con un proyecto de exploración que determine la existencia o no de hidrocarburos; continúa con el descubrimiento y culmina con el desarrollo o explotación. La última etapa comprende la recuperación primaria, secundaria, avanzada y mejorada, y concluye con el abandono del yacimiento cuando deja de ser rentable.

La recuperación requiere de la implementación de, al menos, uno de los mecanismos referidos en la figura 20.1.

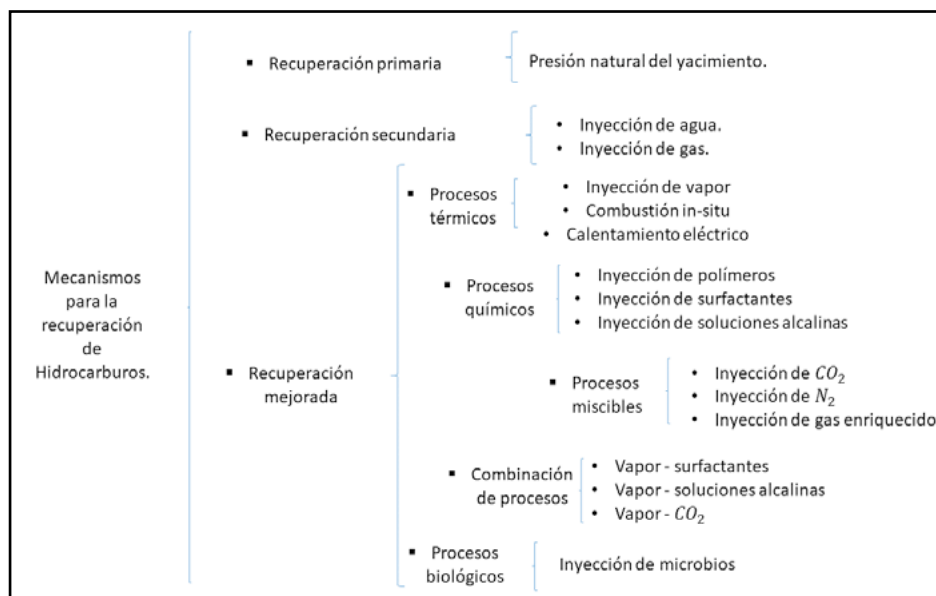


Figura 20.1. Principales tipos de mecanismos para la recuperación de hidrocarburos (Modificado de Facultad de Ingeniería, UNAM 1987).

### 20.2.1 Recuperación primaria

Es la primera etapa de recuperación de petróleo y gas de un yacimiento aprovechando sólo la presión natural para lograr la salida de los fluidos por un pozo, hasta la superficie (Figura 20.2). La energía que desplaza a los hidrocarburos en un medio poroso y permeable se debe al drenaje por gas, por agua o gravitacional: la presión natural del yacimiento es considerablemente superior a la ambiental. La eficiencia del desplazamiento depende de los mecanismos de producción que empleen, como la expansión de la energía natural del gas en disolución, el empuje por el casquete de gas, la absorción espontánea, el empuje por afluencia del acuífero, la expansión del sistema roca-fluido y el drenaje gravitacional (CNH, 2010, Rangel-Germán E. R. 2012). En la medida que la presión del yacimiento disminuye, debido a la extracción, también disminuye la presión diferencial. Es necesario, entonces, reducir la presión del fondo del pozo o incrementar la presión diferencial para aumentar la producción. Se puede implementar un sistema de levantamiento artificial mediante la instalación de una bomba de varilla, una bomba eléctrica sumergible o una instalación de levantamiento artificial por gas.

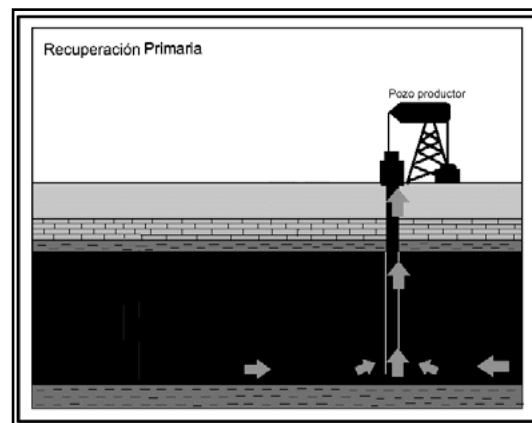


Figura 20.2. Modelo esquemático de recuperación primaria con la que se obtiene el hidrocarburo por las condiciones de presión naturales del yacimiento. (Tomada de Brito-Schulz, M., 2017)

La etapa de recuperación primaria alcanza su límite cuando la presión del yacimiento es tan baja que los índices de producción no equivalen a un rendimiento económico (Schlumberger, 2017). Durante ésta, generalmente, se produce del 5 al 25% de hidrocarburos líquidos, dependiendo de



las características geológicas y petrofísicas del yacimiento, así como de las cualidades de las instalaciones de producción.

### 20.2.2 Recuperación secundaria

Este método consiste en el suministro de energía que se suma a la del yacimiento, con el fin de proveer un empuje adicional a los hidrocarburos, mediante la inyección de fluidos inmiscibles, como agua, gas o la combinación de ambos. Es la segunda etapa de producción de hidrocarburos, durante la cual, un fluido externo permite incrementar la recuperación, condición que se ilustra en la Figura 20.3. La inyección de agua o gas en el yacimiento moviliza los fluidos hasta un pozo productor.

La inyección de agua es el método de recuperación secundaria más utilizado mundialmente; esto se debe a tres factores primordiales: su bajo costo, su inmediata disponibilidad y su gran efectividad para

desplazar al hidrocarburo a través de los poros del yacimiento. Las principales fuentes de abastecimiento son tres: agua congénita producida en el mismo yacimiento, agua dulce producida en acuíferos cercanos y agua de mar tratada químicamente, para evitar incompatibilidad con la formación productora (CNH, 2010). La composición química del agua se adecua a las condiciones específicas del yacimiento y para su traslado se emplea el método que represente un menor costo.

Cuando se utiliza gas, éste se inyecta en el casquete, puesto que este fluido se acumula en las porciones superiores del yacimiento. Las características de presión, temperatura y fluidos conducen a un incremento de la presión misma en la zona de gas libre. La energía proporcionada por la expansión del casquete de gas constituye el principal mecanismo de empuje para la recuperación de hidrocarburos líquidos. Las principales fuentes de abastecimiento son: gas natural producido en el mismo yacimiento o gas natural que se transporta desde yacimientos ubicados en sitios próximos y que tienen una composición química similar.

La recuperación de hidrocarburos en yacimientos convencionales en los que se ha utilizado este tipo de recuperación se encuentra en el rango de 30 y 50 % (Lake, L. 2008, Chiericci, Gian, L., 1994); dichas cifras están en función de las características de los fluidos del yacimiento, de las características geológicas, de las características petrofísicas y de la relación de movilidad entre agua y aceite. La etapa de recuperación secundaria alcanza su límite cuando el fluido inyectado se aplica en cantidades considerables en los pozos productores y la producción de hidrocarburos líquidos deja de ser rentable económicamente.

### 20.2.3 Recuperación mejorada

Esta técnica consiste en la inyección de materiales que normalmente no están presentes en el yacimiento o materiales que están en el yacimiento pero que son inyectados en condiciones específicas, con el objetivo de alterar las propiedades físico-químicas de los fluidos y desplazarlos hasta la superficie a través de los pozos (Lake, L., 1989). También es conocida como *recuperación de petróleo ampliada* o *recuperación terciaria* y se abrevia EOR, por sus siglas en inglés (Enhanced Oil Recovery). Esta técnica abarca un rango muy amplio de hidrocarburos, desde

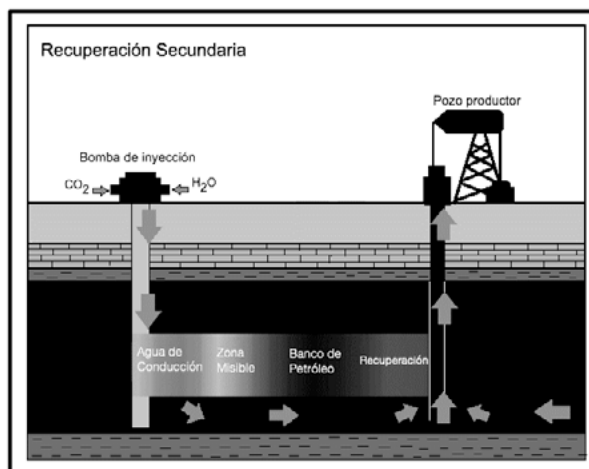


Figura 20.3. Modelo esquemático de la recuperación secundaria por la cual se recuperan hidrocarburos por la inyección de agua o gas. (Tomada de Brito-Schulz, M., 2017)



crudos con altos grados API y viscosidades bajas, hasta los que contienen bajos grados API y viscosidades altas. En cuanto a las condiciones geológicas, abarca desde litologías carbonatadas con baja permeabilidad a profundidades considerables, hasta formaciones arenosas con alta permeabilidad en aguas someras. En general, los métodos EOR pueden aplicarse en cualquier sistema roca-fluido (CNH, 2012). La Figura 20.4 muestra de manera esquemática el modelo de recuperación mejorada.

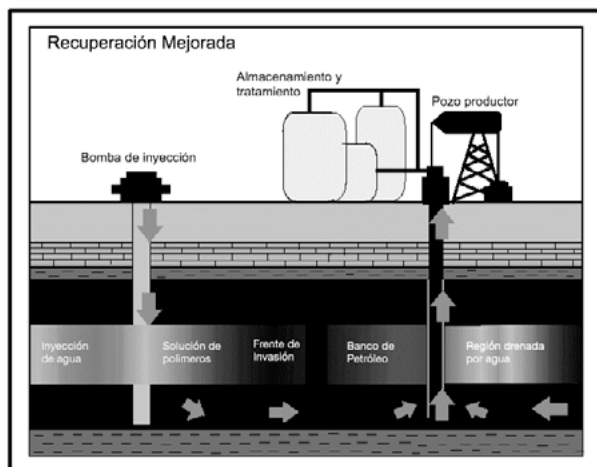


Figura 20.4. Modelo esquemático recuperación mejorada. (Tomada de Brito-Schulz, M., 2017)

Los métodos de recuperación mejorada disminuyen la saturación residual del aceite que permanece en los poros de la formación y que está retenida por las fuerzas capilares y viscosas que impiden que fluya hacia los pozos productores (CNH, 2012). Esta técnica puede ser implementada en cualquier momento durante la vida productiva de un yacimiento. Su propósito no es solamente restaurar la presión de la formación, sino mejorar el desplazamiento del petróleo o del flujo de los fluidos en el yacimiento, hasta los pozos productores (Schlumberger, 2017). Utilizando este método, el factor de recuperación se puede incrementar de 50 % al 70 % del volumen original.

Las alternativas de recuperación mejorada involucran fenómenos químicos que el ingeniero de producción debe aprovechar para optimizar la extracción. Las técnicas son muy variadas y se clasifican de acuerdo con la naturaleza de los procesos empleados en los siguientes casos: a) procesos químicos, b) procesos térmicos, c) procesos miscibles, d) procesos con uso de gases de combustión inertes y e) procesos con uso de microorganismos.

### 20.2.3.1 Procesos químicos

De acuerdo con Chiericci, G. L., (1994), algunos compuestos químicos son inyectados en el yacimiento de hidrocarburos líquidos con el objetivo de reducir la tensión interfacial (incrementar el número capilar) y mejorar el control sobre la movilidad (reducir la canalización), para incrementar el factor de recuperación. Los principales métodos químicos incluyen la inyección de surfactantes, polímeros y álcalis (CNH, 2012), cuyas características generales se muestran en la Tabla 20.1. También puede ser empleada una combinación de álcali-surfactante-polímero (ASP).

Álcalis	<ul style="list-style-type: none"> <li>Este método reduce la tensión interfacial entre el aceite con un pH bajo que usualmente se debe a la presencia de resinas y asfaltenos.</li> <li>Esta fase acuosa reacciona con radicales y forma surfactantes, alterando la mojabilidad de la roca.</li> </ul>
Surfactantes	<ul style="list-style-type: none"> <li>Disminuye la tensión interfacial hasta movilizar el aceite residual, creando un banco de aceite, de manera que fluya con el agua en fases continuas.</li> <li>Es aplicable en arenas con fluidos ligeros a intermedios en densidad y con valores de viscosidad bajos.</li> </ul>
Polímeros	<ul style="list-style-type: none"> <li>Incrementa la viscosidad del agua y reduce la permeabilidad debido a la adsorción de las moléculas del polímero.</li> <li>Es aplicable en formaciones de arenas con fluidos ligeros a intermedios, con porosidades buenas o intermedias.</li> </ul>

Tabla 20.1. Métodos químicos con sus principales objetivos (Modificada de Páez-Orozco, 2017 y CNH, 2012).





### 20.2.3.1.1 Inyección mediante disoluciones alcalinas

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

Este procedimiento consiste en la inyección de disoluciones alcalinas conocidas como *bases*, por su pH superior a 7. Son sustancias en disolución acuosa que reaccionan con ácidos para formar surfactantes *in situ*. Los álcalis más utilizados son el hidróxido de sodio (NaOH), carbonato de sodio (Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>), hidróxido de potasio (KOH), silicato de sodio (Na<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>) y fosfato sódico (Na<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>), entre otros. Estas disoluciones reaccionan con los ácidos orgánicos presentes naturalmente en los aceites crudos, llevando a cabo reacciones de neutralización, con las que se generan las sales correspondientes (surfactantes naturales similares a los jabones) que mejoran la movilidad del hidrocarburo líquido a través del yacimiento y hacia los pozos productores (Salager, J., 2005).

Es necesario conocer el número ácido ( $N_{ac}$ ), definido como la cantidad de hidróxido de potasio (KOH) requerido para neutralizar los ácidos en un gramo de la formación. Esta cantidad está expresada en miligramos y, se ha determinado que su valor debe ser mayor o igual a 0.5 (mgKOH/g), (Páez-Orozco, P. G., 2017; Rivera-Sánchez, L. E., 2015). Los factores que pueden alterar las propiedades del álcali son los siguientes:

- La cantidad de sales (salinidad): entre mayor sea la salinidad, será mayor también la cantidad de iones y menor la concentración coloidal para los surfactantes generados.
- El contenido de minerales con composiciones metálicas, principalmente si en su estructura química hay magnesio y calcio, ya que estos elementos se precipitan como sólidos y generan taponamientos.

Este método de recuperación es recomendado para yacimientos que contienen aceites pesados, en los cuales los mecanismos que incrementan la recuperación pueden ser: por disminución en la tensión interfacial entre el agua y el aceite y también por emulsificación del agua y el aceite. Estos procedimientos ayudan a vencer fuerzas capilares que promueven la salida del aceite del medio poroso y/o solubilización de las películas interfaciales. Además, el producto químico alcalino puede reaccionar con la roca del yacimiento, provocando una alteración favorable.

La Figura 20.5 muestra un esquema del proceso de inyección por álcalis, los cuales pueden ser consumidos por las arcillas, cuya capacidad de adsorción afecta la tensión interfacial.

El método resulta positivo cuando el aceite tiene bajo pH (alta acidez), el cual se debe a la presencia de moléculas (resinas y asfaltenos) que contienen radicales ácidos. Con él se reduce la tensión interfacial entre el aceite y la fase acuosa, porque el álcali reacciona con los radicales en el aceite, formando surfactantes. La mojabilidad de la roca es alterada por la interacción entre el álcali y las moléculas polarizadas adsorbidas por los granos de la roca. Finalmente, se forma una emulsión agua/aceite. En el caso de aceites pesados y viscosos, estas emulsiones tienen menor viscosidad que el aceite y mejoran el flujo a través del yacimiento. Estos tres factores contribuyen a la mejora de desplazamiento del aceite por el agua hacia los pozos productores (Chiericci, G. L., 1994).

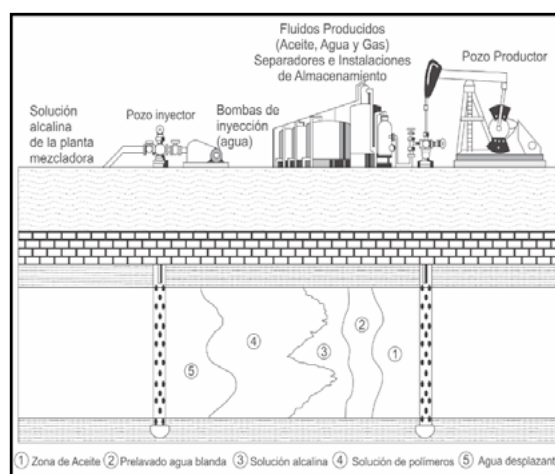


Figura 20.5. Inyección de álcalis (Modificado de Páez-Orozco, 2017 y CNH, 2012).





### 20.2.3.1.2 Inyección por surfactantes

Los surfactantes, también llamados *tensoactivos*, son sustancias cuyas moléculas poseen un grupo polar hidrofílico, soluble en agua, y un grupo no polar hidrófobo o lipofílico, soluble en aceite, que propician que dos sustancias inmiscibles aumenten su solubilidad, generen disolución o formen micelas en las que la parte hidrofóbica encapsula el aceite. La parte hidrofílica queda expuesta al medio acuoso, en el cual varias micelas pueden formar una emulsión. Su función es disminuir la tensión interfacial entre el aceite crudo y el agua, para desplazar volúmenes de hidrocarburos líquidos atrapados. Este proceso puede ser aplicado después de la implementación de un método de recuperación de inyección con agua, inoculando múltiples baches o tapones, junto con otros agentes químicos. Los aditivos químicos reducen las fuerzas capilares que mantienen atrapado el hidrocarburo líquido en la roca, el cual es desplazado con el bache de surfactante, formando un banco fluyente de agua con petróleo que se dispersa delante del tapón surfactante (Páez-Orozco, P. G., 2017).

Los surfactantes más utilizados en la industria son los sulfonatos de petróleo o sintéticos combinados con agentes oxialquilados y agua, que incluyen hidrocarburos, alcoholes, polímeros y sales inorgánicas, inyectables en yacimientos con temperaturas menores a 93 °C con bajas salinidades (Van Poolen, H. K. and Associates, 1980).

La movilidad del petróleo residual está sujeta a una competencia entre las fuerzas viscosas y las fuerzas capilares que se expresa a través del denominado *número capilar*, mediante la siguiente relación:

$$Nc = \mu\gamma / (\sigma \cos\theta)$$

Donde:

$\mu$ : viscosidad del fluido desplazante.

$\theta$ : ángulo de contacto.

$\gamma$ : velocidad del fluido desplazante.

$\sigma$ : tensión interfacial.

La aplicación de surfactantes, en condiciones físico-químicas apropiadas, permite obtener valores de tensiones interfaciales pequeños, gracias al principio de absorción, el cual deberá ser menor sobre la superficie de la roca para evitar que se aumente el costo económico del proceso.

De acuerdo con su carga, los surfactantes se clasifican en aniónicos, catiónicos, no iónicos y anfotéricos. Para la recuperación mejorada, los surfactantes más utilizados son los aniónicos, entre los que destacan los sulfonatos ( $RSO_3^-$ ), cuya fórmula de agente tensoactivo permite optimizar el proceso de recuperación. La molécula del surfactante aniónico (cargado negativamente,  $RSO_3^-$ ) se descarga con un catión metálico inorgánico (generalmente sodio, Na) asociado con el monómero (Ramírez-Terrones, B., 2017). Las principales estructuras moleculares de los surfactantes son las que se indican esquemáticamente en la Figura 20.6.

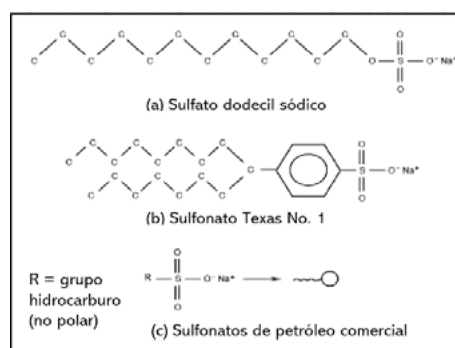


Figura 20.6. Estructuras moleculares representativas de los surfactantes.

El sulfonato de petróleo es un surfactante aniónico que puede ser producido por la introducción del grupo sulfónico  $-SO_3H$  en un químico orgánico puro (sulfonatos sintéticos), o en una corriente de refinación de masa molar intermedia.

El procedimiento consiste en inyectar, inicialmente, cierto volumen de salmuera (disolución de gran cantidad de sal en  $H_2O$ ) para cambiar la salinidad del yacimiento, de tal forma que, al mezclarse con el surfactante, no cause disminución de la actividad interfacial. Posteriormente se inyecta el bache micelar, el cual puede ser empujado con una solución polimérica que mejore la



relación de movilidades. Por último, se procede a la inyección de agua simple para empujar todos los baches inyectados a los pozos productores (Páez-Orozco, P.G., 2017).

El fundamento de la tecnología en la recuperación mejorada consiste en la aplicación de un tapón de tensioactivos, la cual se logra, con la creación de una microemulsión que permita establecer miscibilidad entre ambos fluidos dentro del medio acuoso, generando un banco de petróleo; es decir, una fase continua del aceite crudo atrapado en los intersticios de la roca. La eficiencia del desplazamiento ocurre cuando se logra una reducción de las fuerzas capilares (Páez-Orozco, P. G., 2017; Rivera-Sánchez, L. E., 2015); ya que estas fuerzas impiden que el hidrocarburo líquido se desplace a través de las restricciones mojables por agua, como las gargantas de poro. Cuando el número capilar es muy alto, predominan las fuerzas viscosas y el aceite remanente puede ser desplazado. Con ello se incrementa el factor de recuperación.

### 20.2.3.1.3 Inyección de polímeros

Con este método se puede obtener un mejor desplazamiento y una mayor eficiencia volumétrica de barrido del hidrocarburo líquido. Durante el proceso de inyección de una mezcla de agua con polímeros solubles se produce una reducción de permeabilidad debido a la adsorción de las moléculas del polímero (Chiericci, G. L., 1994), disminuye la tensión interfacial, se altera la mojabilidad (ángulo de contacto o cambio total) y se mejorara la relación de las movilidades de los hidrocarburos líquidos.

El rango de viscosidad para este método se encuentra de 100 a 150 cP. Si la viscosidad del aceite es mayor, se necesitarán grandes concentraciones de polímeros para alcanzar la movilidad. La temperatura debe ser menor a 93 °C para evitar la degradación de los polímeros. La profundidad para minimizar la degradación es alrededor de 2,740 m (Mata Argandoña, J. J., 2010). En la Figura 20.7 se muestran factores que pueden alterar a los polímeros, así como su pérdida.

La finalidad del método es reducir la relación de movilidades agua-aceite, de tal manera que, si aumenta la viscosidad del agua y se aproxima a la viscosidad del aceite, la relación de movilidades baja y evita que el agua viaje por canales de mayor permeabilidad. Dicha movilidad se expresa como:

$$M = \frac{\lambda_w}{\lambda_o} = \frac{k_w \mu_o}{k_o \mu_w}$$

Donde:

$\lambda_w$  = movilidad del agua, mD/cP.

$\lambda_o$  = movilidad del aceite, mD/cP.

$k_w$  = permeabilidad efectiva al agua, mD.

$k_o$  = permeabilidad efectiva al aceite, mD.

$\mu_w$  = viscosidad del agua, cP.

$\mu_o$  = viscosidad del aceite, cP.

Para que una solución polimérica inyectada sea efectiva, debe permanecer estable por un periodo largo de tiempo. Los polímeros son sensibles a degradaciones térmicas, químicas, mecánicas y microbianas. Las más severas son causadas por la temperatura y la salinidad, ya que se ha comprobado que las soluciones de macromoléculas pueden trabajar bien con degradaciones mecánicas y microbianas en los yacimientos (Littmann, W. 1988).

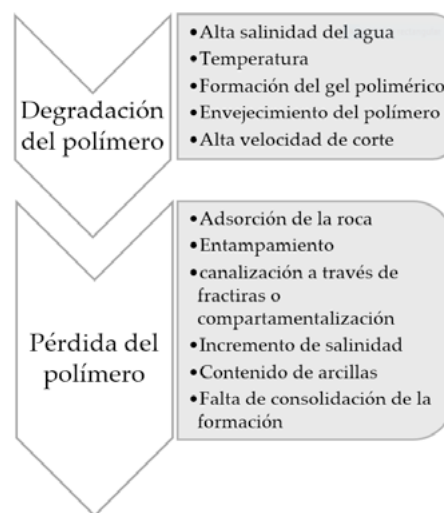


Figura 20.7. Factores de degradación y pérdida del polímero (Modificado de Páez-Orozco, P. G., 2017 y Rivera-Sánchez, L. E., 2015).



El mundo de los polímeros es amplio y variado. En este capítulo nos enfocaremos en los que se usan principalmente en la extracción del crudo. El término “polímero” se deriva de las palabras griegas “polys” que significa muchos y “meros” que significa partes o unidades; así, un polímero es un producto químico constituido por macromoléculas en forma de cadenas formadas por moléculas simples, llamadas *monómeros* (Figura 20.8). Éstos forman largas cadenas que se unen entre sí por fuerzas de Van der Waals, puentes de hidrógeno o interacciones hidrofóbicas.

Para que un compuesto químico funcione como monómero deberá tener al menos dos sitios reactivos, con los cuales otro monómero pueda unirse y formar el polímero. La característica principal es su gran masa molar que puede oscilar entre miles y millones de gramos y es proporcional al grado de polimerización; es decir, del número de monómeros presentes en el polímero (Brown, L. S. and Holme T., 2011).

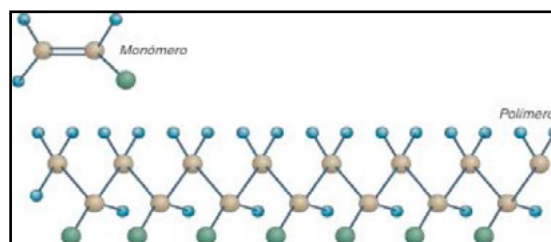


Figura 20.8. Ejemplo de un polímero y su monómero.

Los polímeros usados en estos procesos se clasifican en dos grupos: *polímeros sintéticos* y *biopolímeros*. El polímero sintético más común es la poliacrilamida y el biopolímero más empleado es la xantana.

La poliacrilamida, es un polímero sintético de cadenas con fórmula química  $(C_3H_5NO)_n$ . La unidad de repetición básica o monómero es una combinación de carbono, hidrógeno, oxígeno y nitrógeno (Figura 20.9).

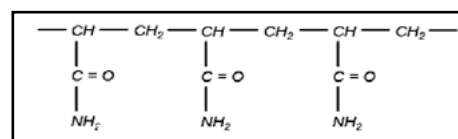


Figura 20.9. Estructura de Poliacrilamida.

La estructura de las poliacrilamidas consiste en una cadena muy larga, formada de manera sintética por la repetición del monómero acrilamida; la masa molar promedio de las especies disponibles en el mercado se encuentra en el rango de 1 a 10 millones gramos por cada mol de polímero, lo que significa que hay millones de monómeros en cada cadena polimérica. Esto determina que a bajas concentraciones aumente significativamente la viscosidad de la disolución. Las poliacrilamidas aumentan la viscosidad de los bolsones de agua que preceden a la inyección final de agua y se utilizan frecuentemente como reductores de movilidad en operaciones de inundación con polímeros micelares (Brown, L. S. and Holme T., 2011).

Una de las principales ventajas de este polímero es que admite la hidrólisis parcial, sustituyendo los grupos amida por grupos carboxilo, creando poliacrilamidas parcialmente hidrolizadas, lo que las hace más solubles en agua dulce que en agua salada, en virtud de las fuerzas intermoleculares ion-dipolo que se pueden crear entre el ion de sodio ( $Na^+$ ) introducido al polímero y el agua, que es una molécula polar. Por lo tanto, estas moléculas poseen una polaridad muy alta, lo que las hace muy afines al agua, pero no al petróleo. Además, son relativamente inmunes al ataque bacterial (Páez-Orozco, P. G., 2017).

El papel de la poliacrilamida es la regulación de la reología de inyección de agua, al aumentar la viscosidad del fluido de conducción, mejorar la eficiencia de inyección de agua y la reducción de la permeabilidad de la formación de fase agua, de modo que el agua y el aceite puedan fluir hacia adelante de manera uniforme. También permite controlar la movilidad de los fluidos que se observa en la eficiencia de la recuperación; esto provoca que el aceite residual se desplace de forma constante y uniforme hasta el pozo; incrementa la viscosidad del fluido, gana espacio y minimiza pérdidas por dilución. Asimismo, evita que el agua conductora (el agua que desplaza a los



polímeros y la micro emulsión a través de la reserva) invada la micro emulsión (Páez-Orozco, P. G., 2017).

La xantana es un biopolímero o polisacárido que se produce en procesos de fermentación de manera natural (Figura 20.10), es decir, sin la intervención directa del hombre. Es producida por la bacteria *xanthomonas campestris* y posee una estructura química mucho más compleja que la correspondiente a las poliácridamidas. La cadena de la xantana es rígida, debido a los ciclos de carbono que contiene la estructura, lo que la hace muy resistente a la degradación mecánica (Littmann, W. 1988).

Este biopolímero aumenta significativamente la viscosidad del agua con alta salinidad, por su afinidad, ya que contiene varias partes iónicas que pueden interactuar con los iones disueltos en agua. Esto da como resultado una interacción ion-ion que proporciona alta estabilidad a la mezcla, debido a que se forma un arreglo de las cargas; sin embargo, en agua dulce tiene menor respuesta que la poliácridamida.

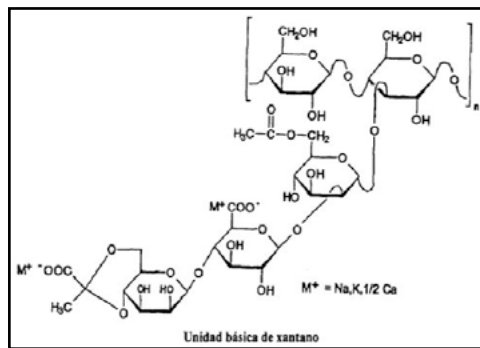


Figura 20.10. Unidad básica de Xantana.

Para la recuperación mejorada de hidrocarburos en lodos a base de agua, el polímero xantana proporciona una reología de lodo no newtoniano, altamente deseable debido al perfil plano de velocidad que produce en el flujo anular, lo que se requiere para una elevación eficiente de los recortes de perforación en lodos de densidades inferiores. El polímero xantana tiene tolerancia a la salinidad y tolerancia regular a los iones que causan la dureza, además de que actúa como una varilla semi rígida en el yacimiento y es resistente a la degradación mecánica (Ramírez-Terrones, B, 2017).

La masa molar promedio de los biopolímeros es menor que el de las poliácridamidas: son del orden de 2 a 5 millones. Por su naturaleza, estos polímeros son muy susceptibles al ataque bacteriano, por lo que sus soluciones deben tratarse con un agente biocida y una sustancia para eliminar el oxígeno disuelto que contrarresten el daño de las bacterias, antes de ser inyectados al yacimiento.

Para la recuperación mejorada de hidrocarburos en lodos a base de agua, el polímero xantana proporciona una reología de lodo no newtoniano, altamente deseable debido al perfil plano de velocidad que produce en el flujo anular, lo que se requiere para una elevación eficiente de los recortes de perforación en lodos de densidades inferiores. El polímero xantana tiene tolerancia a la salinidad y tolerancia regular a los iones que causan la dureza, además de que actúa como una varilla semi rígida en el yacimiento y es resistente a la degradación mecánica (Ramírez-Terrones, B, 2017).

#### 20.2.3.1.4 Combinaciones de álcali-surfactante-polímero

Este método implica la inyección de una combinación de álcali-surfactante-polímero (ASP), para mejorar también el desplazamiento de los hidrocarburos líquidos. En conjunción con el surfactante adicionado, los surfactantes generados in situ por las reacciones químicas entre el álcali inyectado y los ácidos orgánicos naturales en el aceite pueden resultar en una tensión interfacial ultra baja. La tensión interfacial ultra baja en la interfaz salmuera-aceite ayuda a emulsionar y movilizar el aceite residual en el yacimiento. Adicionalmente, la superficie de la roca del yacimiento se carga negativamente. Estos iones negativos no sólo previenen la adsorción de químicos aniónicos, tales como surfactantes aniónicos y polímeros, sino que también cambian la mojabilidad de la superficie de la roca. El surfactante añadido puede mejorar la tolerancia de la salinidad del álcali. El polímero inyectado puede mejorar significativamente la relación de movilidad, además de que su adsorción en la roca donde se encuentra el yacimiento puede reducir la permeabilidad efectiva al agua. Por lo tanto, el polímero mejora la eficiencia de barrido horizontal y vertical al disminuir la tensión interfacial entre agua/aceite e incrementa la viscosidad del agua para mejorar la movilidad (Shutang, G., Qiang, G., Lin J., 2010). De acuerdo a Rivera Sánchez, L. E., 2015, los factores que afectan la interacción entre los surfactantes y los polímeros son, principalmente, los siguientes:





- Temperatura: Incrementa el punto de concentración micelar crítica y la interacción se vuelve menos favorable.
- Adición de electrólitos: Decrece la concentración micelar crítica y aumenta la unión.
- Estructura del surfactante: Cadenas complejas que disminuyen las interacciones.
- Peso molecular del polímero: Optimiza una interacción al calcular las proporciones adecuadas.
- Cantidad de polímero: La concentración micelar crítica no es muy dependiente de la concentración de polímeros.

### 20.2.3.2 Procesos térmicos

Los métodos térmicos han sido utilizados, principalmente, para el desplazamiento de aceites pesados. Proporcionan aproximadamente el 70 % de la producción mundial proveniente de métodos de EOR. El mecanismo de producción consiste en la transferencia de energía térmica hacia el yacimiento. La temperatura del aceite se eleva drásticamente generando expansión de los fluidos, evaporación de un porcentaje de líquidos, reducción de las viscosidades y, consecuentemente, aumento de la movilidad. Comúnmente se aplican a yacimientos de aceites pesados y viscosos, los cuales tienen densidades menores a 20°API y viscosidades entre 200-2000 cP (Rangel, E. 2012). Dentro de estos procesos se encuentran la inyección de vapor cíclica o continua, de agua caliente y de aire para generar una combustión in-situ dentro del yacimiento (CNH, 2010).

#### 20.2.3.2.1 Inyección de aire o combustión in situ

Este método implica lograr la combustión del aceite en un medio poroso, ya sea en forma natural o por medio de un calentamiento de fondo. Una vez que se crea este frente de combustión, el hidrocarburo es desplazado mediante la inyección de aire hacia los pozos productores. Este método se puede aplicar a yacimientos donde ya se ha implementado recuperación primaria y secundaria o en yacimientos con aceites pesados que no se pueden producir por métodos convencionales (Páez-Orozco, P. G., 2017).

Los procesos que ocurren en este tipo de combustión son:

- Empuje miscible generado por gas (expansión térmica).
- Adición de presión en el yacimiento por efectos del gas y fluidos que son inyectados.
- Aumento de volumen del aceite al estar en contacto con el gas y su dilatación térmica.
- Reducción de la viscosidad por efectos de la temperatura y volumen.
- Aumento de la movilidad por la reducción de la viscosidad.

Existe otra metodología llamada *combustión in situ húmeda*, que consiste en inyectar aire a altas temperaturas junto con agua caliente, la cual favorece el transporte de calor e incrementa la eficiencia térmica durante este proceso.

#### 20.2.3.2.2 Inyección de agua caliente

Esta metodología consiste en la inyección de agua caliente con el objetivo de disminuir la viscosidad del aceite crudo y que éste se desplace hacia el pozo productor. Es empleada, principalmente, en hidrocarburos líquidos viscosos. En este proceso se divide el área de interés en dos zonas: la que está cercana al pozo inyector, donde al aumentar la temperatura, disminuye la saturación de aceite residual y la zona alejada al punto de inyección, donde se pierde el calor del agua inyectada de manera paulatina, conforme se acerca al pozo productor, por lo que el desplazamiento del aceite se realiza a la misma temperatura de la formación (Páez-Orozco, P. G., 2017; Rivera-Sánchez, L. E., 2015).

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

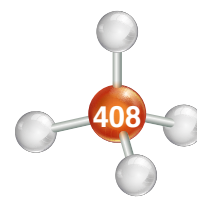
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22







### 20.2.3.2.3 Inyección de vapor

Esta metodología implica procesos de inyección continua de vapor para la recuperación de aceite pesado y viscoso, elevando su movilidad y disminuyendo su viscosidad. El vapor puede ser inyectado de manera continua o cíclica. Se puede implementar con buenos resultados si existen las siguientes condiciones (Rivera Sánchez, L. E., 2015):

- Permeabilidad alta, preferentemente en la proximidad de los pozos productores.
- Profundidad moderada del yacimiento, si el vapor se genera en superficie.
- Espesores considerables de roca saturada de hidrocarburos líquidos.
- Suficiente cantidad de agua para generar vapor.
- Bajo costo de los combustibles que se emplean para generar vapor.

La inyección cíclica de vapor se aplica, preferentemente, para aceites altamente viscosos y opera mediante un pozo que funciona como inyector y productor, alternativamente, considerando ciclos que se cumplen en tres etapas. En la primera, el vapor se inyecta continuamente por determinado tiempo; luego, el pozo es cerrado para que el calor inyectado se transfiera y distribuya en la vecindad del pozo; en la última, el pozo es abierto a producción. Inicialmente se observa un incremento de volumen producido por un corto periodo y, posteriormente, un lento descenso durante un lapso que puede variar de meses hasta un año, aproximadamente (Rivera-Sánchez, L. E., 2015).

### 20.2.3.3 Procesos miscibles

Estos procesos incluyen la inyección de solventes como agentes desplazantes, miscibles en el yacimiento de aceite crudo. Provocan la disminución de la tensión interfacial entre fluidos, aumentando la capilaridad y desplazando al aceite que está en contacto con el solvente. Forman una zona de transición o mezclado, recuperando, en la mayoría de los casos, del 10 al 15% del aceite residual del yacimiento (Brito-Schulz, M., 2017). Los fluidos que más se utilizan son: nitrógeno a alta presión, dióxido de carbono, alcohol, propano o metano a alta presión, metano enriquecido con hidrocarburos ligeros y gas licuado de petróleo (LPG).

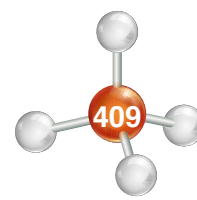
La inyección del dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) se utiliza comúnmente para recuperar el aceite de los yacimientos donde la presión inicial se ha agotado. Se inyecta agua en el yacimiento hasta que se restablece la presión a un nivel inicial, luego se introduce  $\text{CO}_2$  por los pozos de inyección. A medida que el  $\text{CO}_2$  se introduce a una zona miscible, forma un frente soluble con el aceite, facilitando el desplazamiento de los fluidos hacia los pozos de producción.

La estimulación cíclica de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) es una operación de un sólo pozo, en el que se inyecta  $\text{CO}_2$ ; después se cierra el pozo durante un tiempo, provocando un "período de remojo", luego se abre, para permitir que se produzcan el aceite y los fluidos asociados. La disolución del  $\text{CO}_2$  en el aceite reduce la viscosidad y facilita que el aceite fluya más hacia el pozo.

La inyección de nitrógeno ( $\text{N}_2$ ) en el yacimiento se utiliza para formar un frente miscible que vaporiza el aceite más ligero. A medida que el frente se aleja de los pozos de inyección, su borde delantero entra en disolución o se vuelve miscible con el aceite contenido en el yacimiento. Es conveniente inyectar agua alternativamente con el nitrógeno para aumentar la eficiencia de barrido del aceite, el que se desplaza hacia los pozos de producción.

### 20.2.3.4 Procesos con uso de microorganismos

Esta metodología consiste en la inyección de bacterias (microbial) o biopolímeros a los yacimientos en campos maduros ubicados a poca profundidad, generalmente a menos de 1500 metros. Se le conoce como MEOR, por sus siglas en inglés (Microbial Enhanced Oil Recovery), y





se caracteriza por utilizar una disolución de microorganismos y nutrientes que se inoculan al mismo tiempo. Los microorganismos son utilizados para producir químicos, llamados *metabolitos*, los cuales mejoran la recuperación de aceite. Con este método se reduce la viscosidad por la producción de gas o degradación de hidrocarburos saturados de cadenas largas; se mejora la permeabilidad absoluta de la roca debido a la generación de ácidos que disuelven la matriz de la roca; se reduce la viscosidad del aceite por biosurfactantes; se crea taponamiento selectivo por microorganismos y biopolímeros y se incrementa la viscosidad del agua debido a los biopolímeros (Lacerda, E. C. M., Primenko, V. I. & Pires, A. P., 2012). Este proceso puede implementarse en tres modalidades:

- a) Bio-polímeros. Mejoran la relación de movilidades del aceite y propician un taponamiento selectivo en zonas barridas.
- b) Bio-gases. Mejoran el factor de recuperación al reducir la viscosidad del aceite, provocando un hinchamiento del mismo. Producen una sobrepresión causada por los gases generados dentro del yacimiento.
- c) Bio-surfactantes. Reducen la tensión interfacial y provocan una emulsión de aceite-agua que altera la mojabilidad, lo que ocasiona un incremento en la recuperación de hidrocarburos líquidos.

#### 20.2.4 Recuperación Avanzada

Conocida por su acrónimo IOR, por sus siglas en inglés (*Improved Oil Recovery*), emplea cualquier método de recuperación de hidrocarburos donde se modifican las condiciones del yacimiento. Utiliza otros mecanismos adicionales a las técnicas de recuperación mejorada. Es aplicada después de las etapas de producción primaria y secundaria.

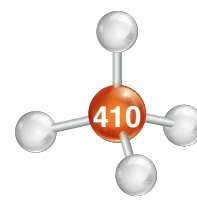
En algunos países, IOR y EOR se utilizan como sinónimos, ya que pueden incluir procesos químicos, mecánicos, físicos o una combinación de éstos. El EOR es un subconjunto del IOR, el cual, en sentido estricto, abarca un amplio rango de actividades como la implementación de técnicas mejoradas de caracterización de yacimientos, administración de yacimientos, perforación de pozos de relleno (Infill drilling) y simulación avanzada (Rangel, 2015).

Los IOR y EOR se entrelazan para obtener mejores formas de recuperación, superiores a las de los métodos tradicionales (Alvarado, V. & Manrique, E., 2001). Su empleo combinado es factor decisivo para la recuperación de un más alto volumen de hidrocarburos líquidos a una mayor velocidad, cuando los citados líquidos no pueden ser movilizados por la inyección de un sólo fluido o por el uso de procesos físicos o mecánicos. Las tecnologías EOR están específicamente diseñadas para afectar al petróleo inmóvil que permanece en el yacimiento, mientras que las estrategias de IOR pueden usarse para recuperar más aceite móvil y/o inmóvil restante.

Si el porcentaje de saturación de aceite residual no es alto, entonces es improbable que los procesos de EOR se utilicen en la estrategia general de IOR (EOGA Oil and Gas, 2017).

### 20.3 Conclusiones

La Química es fundamental en todas las etapas de producción de un yacimiento petrolero. Inicialmente en la recuperación primaria es importante conocer la composición química de los hidrocarburos y sus propiedades, posteriormente, en la recuperación secundaria, mejorada y avanzada, se puede incidir positivamente en la implementación de las mejores técnicas de recuperación del aceite residual. Al emplear compuestos químicos se puede favorecer un incremento significativo de la recuperación de hidrocarburos líquidos en campos petroleros maduros. En la implementación se debe de tomar en cuenta entre otros aspectos, la composición química de los fluidos del yacimiento, la presión, la temperatura, el volumen, el tipo de rocas que almacenan y sellan los yacimientos.





# Capítulo 21

## La Geotermia como manifestación de la Energía Química

Gabriel Salinas Calleros

### 21.1 Introducción

La energía debe ser asumida como un recurso natural con una gran variedad de elementos asociados que permiten utilizarla industrialmente. Es, asimismo, la capacidad de poner en movimiento o transformar algo. La química, por su parte, es la ciencia que estudia la composición, estructura y propiedades de la materia y sus modificaciones resultantes de las reacciones químicas.

La *energía química* es producida por reacciones de este tipo. Por ejemplo, la que desprende el carbón al quemarse. En este caso, el calor producto de una reacción genera movimiento o permite desarrollar un trabajo.

Entonces, el calor es una manifestación de energía, siempre presente en la materia.

El utilizar el calor contenido en la Tierra ofrece grandes ventajas: aporta un elevado rendimiento y un mínimo nivel de emisiones contaminantes, entre otras.

La investigación sobre los recursos energéticos ha dado lugar a diferentes metodologías para obtener energía. Entre éstas se encuentra la *geotérmica* con la cual se aprovecha el calor existente en el interior de la corteza terrestre. Actualmente la energía geotérmica es empleada para producir electricidad.

La aplicación de métodos geoquímicos en la exploración de recursos geotérmicos es fundamental. En especial, la caracterización química de los fluidos geotérmicos ayuda a definir el mejor empleo de la Geotermometría de fluidos acuosos y gaseosos, así como a la definición de los isótopos estables presentes en los sistemas geotérmicos para su evaluación y caracterización. Además, la

### Sumario

#### 21.1 Introducción

#### 21.2 El calor de la Tierra

#### 21.3 El flujo de calor terrestre

#### 21.4 La Propagación de calor en la Tierra

#### 21.5 Manifestaciones geotérmicas

#### 21.6 Recursos geotérmicos en explotación

#### 21.7 Tipos de yacimientos geotérmicos

#### 21.8 Entalpía

#### 21.9 Clasificación de recursos geotérmicos

#### 21.10 Generación de electricidad de origen geotérmico

#### 21.11 Campos geotérmicos en México

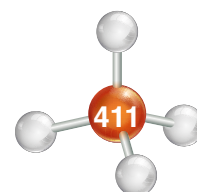
#### 21.12 Impacto ambiental del uso de la geotermia

#### 21.13 Técnicas de exploración de los recursos geotérmicos

#### 21.14 Nuevas tecnologías en exploración geotérmica

#### 21.15 Programa general de exploración geotérmica

#### 21.16 Conclusiones





utilización de indicadores de actividades geotérmicas, tales como minerales de alteración, elementos traza mayores y menores y geoquímica de suelos.

Las estrategias para la exploración de recursos geotérmicos requieren de la integración de estudios geoquímicos, geológicos, geofísicos e hidrogeológicos.

## 21.2 El calor de la Tierra

Hace aproximadamente 4 500 millones de años, nuestro planeta era una inmensa nube ardiente formada esencialmente por gases y polvo. El proceso de enfriamiento y consolidación, inició hace unos 3 800 millones de años, formando una corteza dura que atrapó en el interior una gran cantidad de calor que todavía perdura.

Desde el punto de vista energético constituye un sistema activo que recibe y transmite energía al medio que lo rodea, y el calor es una parte importante de esa energía. La mayoría de los procesos geodinámicos, desde los más superficiales, son controlados por la transferencia y generación de calor en su interior.

Desde el centro hasta la superficie, el globo terrestre está constituido por tres capas sucesivas con temperatura decreciente (Figura 21.1):

El **núcleo**, sólido en su parte interna y líquida en su parte exterior registra una temperatura que puede alcanzar los 4 200° C.

El **manto** que lo envuelve, con temperaturas que van desde los 3 000 a los 1 000° C, de textura plástica hacia el centro, se vuelve sólido hacia la superficie.

La **corteza** que corresponde a la envoltura superficial posee una temperatura que varía de los 1 000° C en su contacto con el manto, hasta los 15 a 20° C de la superficie terrestre. Su espesor varía desde 5 a 20 km en las profundidades oceánicas y de 30 a 70 km bajo los continentes. Con la parte sólida del manto constituye la **litósfera**, constituida por varias placas que se mueven lentamente, unas con relación a otras, pudiendo dar lugar a importantes anomalías térmicas en sus bordes.

El resultado de esta estructura interna es que el 99% de la masa de nuestro planeta está sometida a una temperatura superior a los 1000° C y, únicamente un 0.1% a temperaturas inferiores a los 100° C.

El origen del calor interno de la Tierra se explica de la siguiente manera:

- Desintegración de isótopos radiactivos presentes en la corteza y en el manto, principalmente Uranio 235, Uranio 238, Torio 282 y Potasio 40.
- Calor inicial liberado durante la formación de la Tierra hace 4 500 millones de años, y que todavía está llegando a la superficie.
- Movimientos diferenciales entre las distintas capas que constituyen la Tierra, principalmente entre el manto y núcleo.
- Cristalización del núcleo. El núcleo externo, por ser líquido, está cristalizando continuamente, en la zona de transición con el núcleo interno, que es sólido, se libera calor.

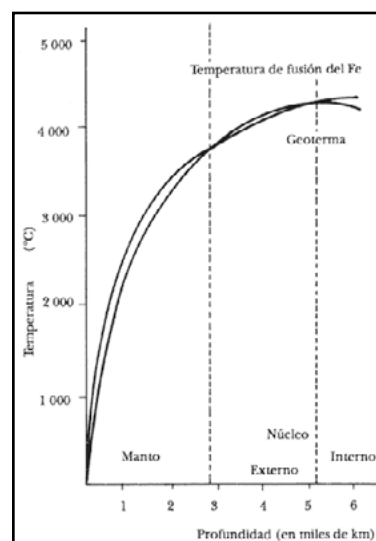


Figura 21.1. Profundidad vs. temperatura del interior de la Tierra (Tomada de Press y Siever, 1974).





Las grandes diferencias de temperatura entre el interior y el exterior de la Tierra originan un flujo continuo de calor. Se estima que la energía que llega cada segundo a la superficie terrestre, en forma de calor, ya sea por conducción, convección o radiación, es de  $42 \times 10^{12}$  J. De ese total,  $8 \times 10^{12}$  J proviene de la corteza, la cual representa sólo el 2% del volumen total del planeta;  $32.3 \times 10^{12}$  J proviene del manto, el cual representa el 82% del volumen total, y  $1.7 \times 10^{12}$  J del núcleo, que representa un 16% en volumen (Guía de la Energía Geotérmica).

El calor de la Tierra es muy grande y solamente una pequeña fracción es utilizada por el hombre. Así lo ha hecho desde épocas remotas con el descubrimiento de la utilidad de los manantiales termales en regiones volcánicas, hasta la época actual en la que, con los medios técnicos disponibles, pueden ser extraídos de la corteza terrestre y transformados en energía eléctrica, o usados directamente para calefacción humana o animal y en procesos industriales y agrícolas.

### 21.3 El flujo de calor terrestre

La energía generada en el interior de nuestro planeta se transfiere lentamente hasta la superficie, ya que las rocas que componen su corteza son muy malas conductoras del calor. El flujo de calor se calcula multiplicando el gradiente geotérmico por la conductividad térmica de las rocas.

El *gradiente geotérmico* es la variación de temperatura en función de la profundidad, expresado en  $^{\circ}\text{C}/\text{km}$ . La *conductividad térmica* es una propiedad característica de cada material que indica su capacidad para conducir el calor. Se expresa en  $\text{W}/\text{m } ^{\circ}\text{C}$ .

El producto de estas dos cantidades proporciona el *flujo de energía*, en forma de calor, por unidad de superficie y por unidad de tiempo. Se expresa en  $\text{MW}/\text{m}^2$ .

El gradiente geotérmico tiene un valor promedio para todo el planeta de  $3.3^{\circ}\text{C}$  por cada 100 m. El flujo de calor terrestre tiene un valor medio en el continente de  $71 \text{ MW}/\text{m}^2$  (Davies & Davies, 2010), pero en determinadas regiones, donde existen anomalías geotérmicas, se pueden medir valores de varias centenas de  $\text{MW}/\text{m}^2$  y en áreas de elevado potencial geotérmico puede alcanzar varios millares.

### 21.4 La propagación de calor en la Tierra

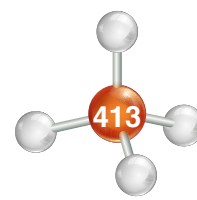
Los mecanismos por los que se propaga el calor, en cualquier medio, son: *conducción*, *convección* y *radiación*.

La *conducción* es la transferencia de calor a través de un medio por interacción entre partículas adyacentes. Puede ocurrir en sólidos, líquidos y gases, aunque es característica de los sólidos, puesto que en gases y líquidos siempre se producirá convección, simultáneamente.

La *convección* es el modo en que se transfiere la energía térmica en un fluido (líquido o gas). Comprende los efectos combinados de la conducción y el movimiento del fluido provocado por las diferencias de su misma densidad.

Las partículas más calientes del fluido y, por tanto, menos densas, ascienden, desplazando a las más frías, que se hunden por gravedad, puesto que son más densas. Cuando éstas, posteriormente, se calientan, son empujadas otra vez hacia arriba. Cuanto más rápido es el movimiento del fluido, mayor es la transferencia de calor por convección.

La *radiación* es la emisión de energía en forma de ondas electromagnéticas, como resultado de cambios en las configuraciones electrónicas de los átomos o moléculas. La radiación térmica es emitida por los cuerpos debido a su temperatura.







Todos los materiales a temperatura superior al 0 absoluto emiten radiación térmica. Los más calientes radian más que los más fríos. Cuando una radiación electromagnética choca con un material, sus moléculas se mueven más rápido, calentando el material.

La transferencia de calor por radiación es la más rápida y no sufre atenuación en el vacío (Figura 21.2).

En la litósfera, la transferencia de calor se produce por conducción: el calor se difunde sin que haya transferencia de materia. En la astenósfera el calor se transfiere con convección, con movimiento de materia. En el resto del manto el calor se transmite, principalmente, por convección.

A la escala de un segundo, el manto es sólido, pero, a escala geológica, se comporta como un fluido viscoso y sus movimientos profundos permiten que el calor interno se propague hacia la superficie. En el núcleo externo, el calor se transmite, principalmente, por convección (Figura 21.3) y en el núcleo interno el mecanismo de propagación más importante es la conducción.

Gran parte de la energía generada en el interior de la Tierra se consume en los procesos que allí suceden. El resto, más la energía procedente de la desintegración de los isótopos radioactivos en el manto y en la corteza, es la que llega a la superficie, la que, finalmente, es irradiada hacia la atmósfera.

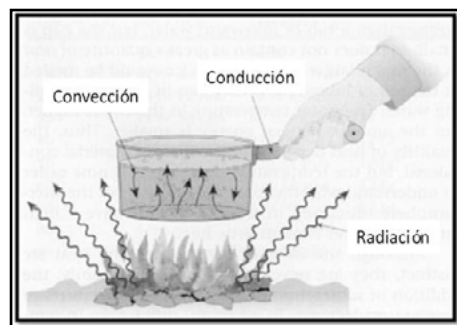


Figura 21.2. Mecanismos de propagación del calor.

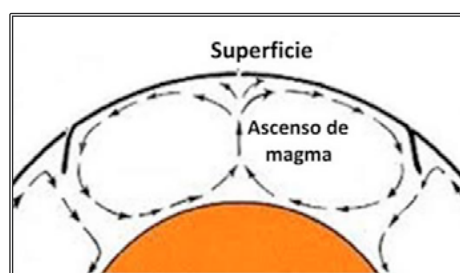


Figura 21.3. Propagación del calor interno de la Tierra (Convección).

## 21.5 Manifestaciones geotérmicas

Las alteraciones geotérmicas de mayor magnitud presentan manifestaciones superficiales que indican su posible existencia. Las más relevantes son:

**Volcán:** Conducto en la corteza terrestre por el cual emanan lava, gases, vapor y/o cenizas, o se derraman continuamente, o bien, a intervalos.

**Aguas termales:** Manantial natural del que brota agua a una temperatura mayor (por lo menos en 5° C) a la temperatura promedio anual de la zona.

**Géiser:** Fuente intermitente de agua líquida mezclada con vapor de agua, a una temperatura de entre 70 y 100° C, con gran cantidad de sales disueltas y en suspensión.

**Fumarolas:** Nombre genérico de una emisión de gases y vapores de agua a altas temperaturas que pueden tener temperaturas mayores a los 100° C.

**Volcanes de fango:** Erupciones de gases y barro que aparecen donde existe agua para sostener un géiser o una fuente termal.

Estas manifestaciones no representan la posible existencia de un gradiente geotérmico aprovechable, pero son el punto de partida para una prospección a detalle.

## 21.6 Recursos geotérmicos en explotación

La Comisión Federal de Electricidad (CFE), organismo público a cargo de la generación, transmisión y comercialización de la energía eléctrica en México, opera cuatro campos geotérmicos a través de su Gerencia de Proyectos Geotermoeléctricos (GPG), con sede en Morelia,



Mich. Esos campos son: Cerro Prieto, Baja California; Los Azufres, Michoacán; Los Humeros, Puebla, y Las Tres Vírgenes, Baja California Sur (Figura 21.4).

### 21.6.1 Campo Cerro Prieto

Se localiza en la porción norte de México, muy cerca de la frontera con Estados Unidos, a unos 30 kilómetros al sureste de la ciudad de Mexicali, capital del estado de Baja California y se ubica prácticamente al nivel del mar. Es de los campos más grandes del mundo, inferior al de The Geysers, en California, EUA, que es el campo con la mayor capacidad instalada.



Figura 21.4. Campos geotérmicos en México

Es un campo de tipo sedimentario, en el cual los fluidos geotérmicos están alojados en rocas areniscas. La fuente de calor es una anomalía térmica formada por el adelgazamiento de la corteza terrestre que ocurre en la cuenca transtensional en la que se ha formado el yacimiento, asociado a la prolongación sur del sistema de fallas activas de San Andrés.

Su capacidad instalada actualmente es de 720 MW y la capacidad operativa es de 570 MW. Las primeras unidades empezaron a operar en 1973. A la fecha cuenta con cuatro unidades de 25 MW, cuatro de 37.5 MW, una unidad de 30 MW de baja presión y otras cuatro de 110 MW cada una.

En Cerro Prieto, la CFE opera un promedio de 168 pozos en producción continua, con una profundidad media de 2 500 metros, que producen más de 52 millones de toneladas de vapor al año a una tasa de 6 mil toneladas de vapor por hora (t/h). Hay en él una laguna de evaporación construida en una superficie de 14 kilómetros cuadrados, con la cual, y con 15 pozos inyectores, se dispone de los más de 70 millones de toneladas de salmuera que salen asociadas al vapor. Durante el año 2013, sus unidades generaron más de 3,996 GWh.

### 21.6.2 Los Azufres

Está localizado en la parte central de México, en el estado de Michoacán, a unos 250 km al occidente de la Ciudad de México, en un complejo volcánico a 2 800 metros de altitud. Se ubica casi en el centro de la Faja Volcánica Transmexicana, que es una franja de volcanes y productos volcánicos cuaternarios que atraviesa México de costa a costa y en la cual se encuentran varios volcanes actualmente activos.

A diferencia de Cerro Prieto, Los Azufres es un campo de tipo volcánico cuyos fluidos geotérmicos están contenidos en rocas de tipo andesítico. La CFE opera en él una capacidad total de 188 MW mediante cinco unidades a condensación (una de 50 MW y cuatro de 25 MW cada una) y siete unidades a contrapresión de 5 MW cada una.

Desde enero del 2015 cuenta con una nueva unidad de 50 MW y se retiraron tres unidades antiguas de 5 MW.

Con esas unidades turbogeneradoras, la central geotermoeléctrica de Los Azufres generó 1 542 GWh en 2013, alimentada por un promedio de 39 pozos productores integrados al sistema de



vapor ductos, que a lo largo del año pasado produjeron 14.6 millones de toneladas de vapor a un ritmo de 1 670 t/h. Seis pozos inyectoros fueron utilizados para regresar al yacimiento 4.4 millones de toneladas de salmuera geotérmica que fueron separadas del vapor.

### 21.6.3 Los Humeros

Es otro campo volcánico, ubicado en la parte oriental de la Faja Volcánica Mexicana en los límites de los estados de Puebla y Veracruz, en el interior de una caldera volcánica cuaternaria cuyas últimas erupciones ocurrieron hace 20 mil años. El campo se ubica a 2 600 msnm. Aquí también son rocas andesíticas las que alojan a los fluidos geotérmicos, los cuales tienen temperaturas medidas de hasta 400° C. La central geotermoeléctrica tiene una capacidad instalada de 93.4 MW que está constituida por dos unidades de 26.7 MW cada una, ocho unidades turbogeneradoras a contrapresión de 5 MW cada una (40 MW en total).

Las siete unidades que estuvieron en operación continua en Los Humeros generaron 345.8 GWh, y fueron alimentadas por 4.3 millones de toneladas de vapor. La CFE maneja actualmente 23 pozos productores integrados al sistema, que producen una cantidad menor de salmuera que los pozos de los otros campos. Durante 2006 la salmuera producida fue de sólo 709 mil toneladas, misma que se inyectó al yacimiento a través de tres pozos inyectoros. A partir de 2016 se cuenta con una unidad más de 26.7 MW y se retiraron 3 unidades de 5 MW.

### 21.6.4 Las Tres Vírgenes

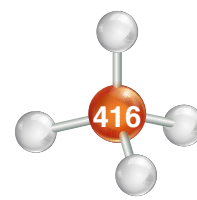
Es, igualmente, un campo volcánico ubicado en la parte media de la península de Baja California, fuera de la Faja Volcánica Transmexicana, en el estado de Baja California Sur. El campo está dentro de un complejo de tres volcanes cuaternarios alineados de norte a sur. Su fuente de calor es, probablemente, la cámara magmática del volcán más reciente y meridional, denominado La Virgen. En esta porción de México el vulcanismo es producto de los movimientos tectónicos que están separando a la península de Baja California y parte de la alta California del resto del continente, a razón de unos 5 cm por año, a lo largo de una zona de fallas de transformación que constituyen la prolongación sur del sistema de San Andrés. Los fluidos geotérmicos del yacimiento están alojados en rocas de tipo intrusivo (granodioritas), sobreyacidas por rocas vulcanosedimentarias.

La central de Las Tres Vírgenes está constituida por dos unidades a condensación de 5 MW cada una, que entraron en operación en 2001. En 2006, la central generó 25 GWh y fue alimentada por 330 mil toneladas de vapor producidas por un par de pozos productores a razón de 38 t/h. Los pozos produjeron también 1.4 millones de toneladas de salmuera, la cual se regresó en su totalidad al yacimiento a través de dos pozos inyectoros.

### 21.6.5 Cerritos Colorados

Conocido anteriormente como La Primavera, este complejo está ubicado en la porción central del país, al occidente de la Faja Volcánica Transmexicana y prácticamente en la periferia de la ciudad de Guadalajara, Jalisco. El campo se ubica dentro de una caldera volcánica de unos 12 km de diámetro formada hace 120 mil años, la caldera de La Primavera, cuya última actividad es un domo riolítico de 20 mil años de antigüedad, extruido en el borde oriental de la caldera.

La fuente de calor es la cámara magmática productora del vulcanismo, localizada en el subsuelo hacia la porción centro-sur de la caldera. Los fluidos geotérmicos están contenidos en rocas andesíticas plio-cuaternarias a profundidades del orden de los 2100 m, sobreyacidas por ignimbritas y sedimentos lacustres y subyacidas por rocas intrusivas que constituyen el basamento. La CFE ha perforado en ese campo 13 pozos exploratorios, seis de los cuales son





productores (Gutiérrez-Negrín, Luis C.A. et al., 2002). Aunque la CFE ha evaluado un potencial inicial suficiente para instalar 75 MW, hasta la fecha el campo no ha podido ser aprovechado por la fuerte oposición en materia ambiental.

## 21.7 Tipos de yacimientos geotérmicos

### 21.7.1 Yacimiento geotérmico típico

Un *yacimiento geotérmico típico* está compuesto por una fuente de calor, un acuífero y la llamada *capa sello*. La fuente de calor es una cámara magmática en proceso de enfriamiento con temperaturas todavía elevadas, de unos 500° C o más. El acuífero es cualquier formación litológica con la permeabilidad primaria o secundaria suficiente para alojar agua meteórica infiltrada desde la superficie o desde acuíferos menos profundos. La capa sello es otra formación rocosa, o parte de ella, con una permeabilidad menor que la del acuífero, cuya función es impedir que los fluidos geotérmicos se disipen totalmente en la superficie (Figura 21.5). Si se tiene el cuidado de extraer una masa de fluidos equivalente a la que se recarga en el yacimiento, sea por medios naturales o artificiales, el recurso es renovable para todo efecto práctico, ya que, aunque la cámara magmática terminará por enfriarse, el proceso tomará algunos miles de años.

El elemento clave del yacimiento es la fuente de calor, cuya existencia, a miles de metros de profundidad, sólo puede deducirse a partir de evidencias indirectas que se aprecian en la superficie. Una de ellas es la presencia de volcanes geológicamente jóvenes (menores de un millón de años), puesto que algunos de ellos, particularmente los de composición ácida, suelen estar asociados a cámaras magmáticas no demasiado profundas, capaces de actuar como fuentes de calor.

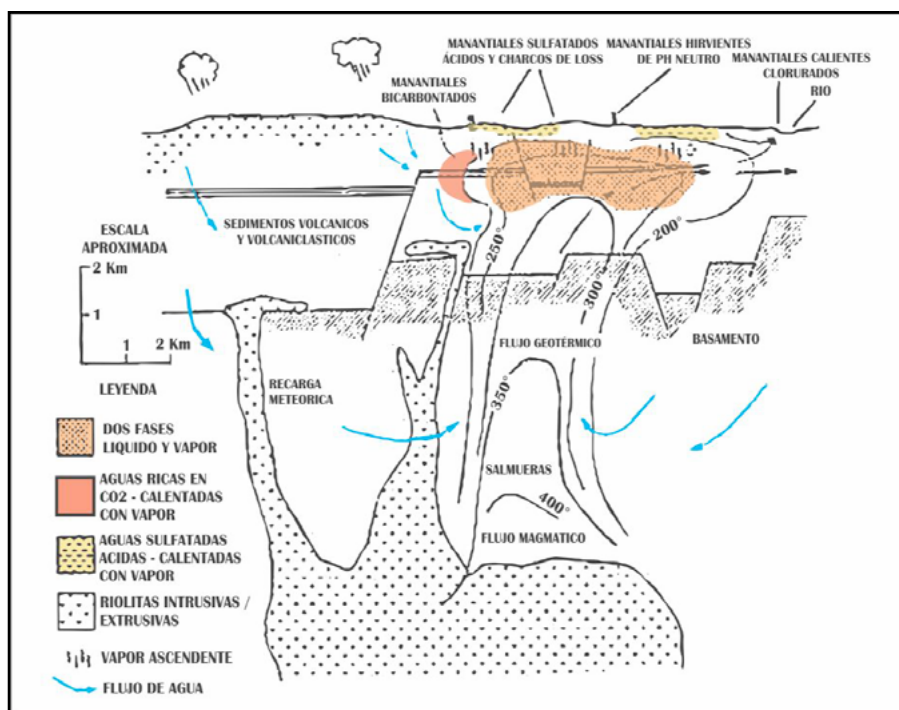


Figura 21.5. Modelo esquemático de un sistema geotérmico típico en terreno volcánico (Hedenquist, 1986).

El vulcanismo, al igual que los sismos, es un fenómeno producido por el movimiento de las placas tectónicas en las que está fragmentada la capa exterior del planeta. En los límites entre una placa y otra, especialmente donde una se desliza debajo de otra en un proceso conocido como *subducción*, son más frecuentes el vulcanismo y la sismicidad y, por lo tanto, la presencia de yacimientos geotérmicos.



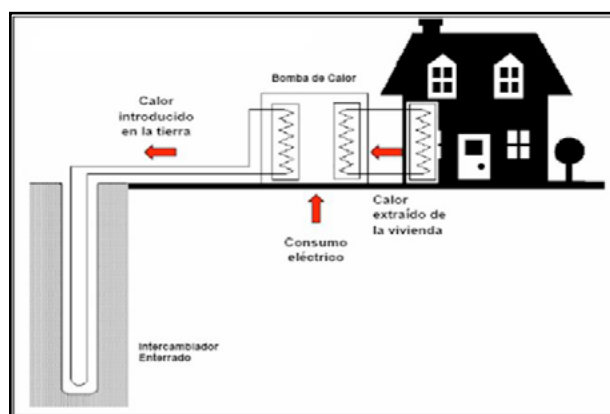


### 21.7.2 Yacimientos de muy baja temperatura

Prácticamente la totalidad de la corteza terrestre del planeta constituye un extenso yacimiento de recursos geotérmicos de muy baja temperatura, a menos de  $30^{\circ}\text{C}$ , interrumpido por la presencia de masas de agua continentales o marinas.

En cualquier punto de la superficie del planeta se puede captar y aprovechar el calor almacenado en las capas superficiales del subsuelo, a pocos metros de profundidad, o en acuíferos poco profundos, para climatización de casas individuales y edificios, a través de bombas de calor geotérmico.

La superficie del suelo intercambia calor con la atmósfera y sufre las variaciones diarias de temperatura hasta una profundidad de 0.5 m. A pocos metros de profundidad, la temperatura permanece relativamente estable, entre  $7$  y  $13^{\circ}\text{C}$ , si se le compara con la temperatura ambiente en superficie (Figura 21.6). Esto se debe al calor recibido del Sol, que calienta la corteza terrestre, especialmente en verano, y a la gran inercia térmica del suelo y las rocas.



Las variaciones diarias de temperatura penetran hasta 20 m y las estacionales hasta 200 m, pero se van amortiguando rápidamente. A partir de 10 m de profundidad y con poca circulación de agua subterránea, el subsuelo es capaz de almacenar el calor que recibe y mantenerlo estacionalmente, de manera que el terreno permanece a una temperatura prácticamente constante durante todo el año.

Figura 21.6. La radiación solar y las condiciones climáticas influyen sobre la temperatura del subsuelo, sólo hasta una cierta profundidad.

A una profundidad de 15 m se considera que el terreno está a temperatura constante todo el año, con un calor ligeramente superior a la temperatura media anual de la superficie. Dicho valor depende del clima, de la vegetación, de la cobertura del suelo, de su pendiente, de la cantidad de nieve y de las propiedades generales del suelo.

A partir de 15 m de profundidad, la temperatura de las rocas, que reciben el calor terrestre que remonta de las profundidades, no depende de las variaciones estacionales de temperatura, ni del clima, sólo de las condiciones geológicas y geotérmicas.

Por debajo de 20 m de profundidad, la temperatura aumenta a razón de unos  $3^{\circ}\text{C}$  cada 100 m como consecuencia del gradiente geotérmico. En la mayor parte de las regiones del planeta, las rocas se encuentran a una temperatura mayor que  $20 - 30^{\circ}\text{C}$  a 500 m de profundidad.

### 21.7.3 Yacimientos de baja temperatura

Yacimientos geotérmicos de baja temperatura, entre  $30$  y  $90^{\circ}\text{C}$ , pueden encontrarse en cuencas sedimentarias en las que el gradiente geotérmico es el normal o ligeramente superior. La única condición geológica requerida es la existencia a profundidad adecuada, entre 1 500 y 2 000 m, de formaciones geológicas permeables, capaces de contener y dejar circular fluidos que extraigan el calor de las rocas. Con un gradiente geológico normal, de alrededor de  $3^{\circ}\text{C}$  cada 100 m, a una profundidad de 2 000 m, la temperatura puede alcanzar  $70^{\circ}\text{C}$  o más.





### 21.7.4 Yacimientos de temperatura media

Yacimientos con recursos geotérmicos a temperaturas comprendidas entre 90 y 150° C se encuentran en numerosos lugares del planeta: en cuencas sedimentarias, como los de baja temperatura, pero a profundidades comprendidas entre 2 000 y 4 000 m; en zonas de adelgazamiento litosférico; en zonas con elevada concentración de isótopos radiactivos o en los mismos ámbitos geológicos que los yacimientos de alta temperatura, pero a menor profundidad (menos de 1 000 m).

Yacimientos de este tipo se encuentran en un gran número de zonas muy localizadas donde, debido a discontinuidades y fallas, el agua puede remontar fácilmente hasta la superficie, señalando su presencia mediante aguas termales.

Al igual que los yacimientos de alta temperatura, necesitan de una fuente de calor y de un acuífero con buena recarga. Se diferencian de ellos en que no existe capa impermeable sobre el acuífero que mantenga el calor y la presión en el yacimiento.

### 21.7.5 Yacimientos de alta temperatura

Los yacimientos con fluidos geotermales, o en rocas calientes, a más de 150° C de temperatura, se encuentran en zonas geográficas con gradiente geotérmico extraordinariamente elevado, hasta 30° C cada 100 m.

Esas zonas suelen coincidir con la existencia de fenómenos geológicos notables, como actividad sísmica elevada, formación de cordilleras en épocas geológicas recientes, actividad volcánica muy reciente y, principalmente, regiones volcánicas situadas en los bordes de las placas litosféricas. Se suelen explotar a profundidades comprendidas entre 1 500 y 3 000 m.

Esos fenómenos no son otra cosa que distintas formas de liberación de la energía interna de la Tierra y se producen como consecuencia de los movimientos de convección de masas de rocas fundidas, magmas procedentes del manto y por los desplazamientos relativos de las distintas placas que constituyen la litósfera terrestre.

La litósfera, formada por la corteza terrestre y parte del manto superior, con un espesor variable entre 70 y 150 km, es frágil y quebradiza. Lejos de ser una capa homogénea, está constituida por 12 placas principales y varias más pequeñas que flotan sobre la astenósfera, formada por material plástico y dotada de movimientos de convección lentos y regulares (Figura 21.7).

Como zonas propicias para el ascenso del magma a la corteza terrestre, pudiendo o no llegar a la superficie, se pueden citar:

- **Dorsales centro oceánicas:** áreas de separación de placas en las que existe una generación continua de corteza a partir de magmas ascendentes.
- **Área de choque de placas:** se produce la subducción de una placa bajo la otra con la consiguiente fusión de corteza y generación de magmas.
- **Área de actividad distensiva:** dentro de una placa, en zonas de adelgazamiento de la corteza, se pueden originar ascensos de magmas procedentes del manto.
- **Puntos calientes (Hot spots):** son áreas de actividad geotérmica situadas en el interior de una placa litosférica. Focos de calor concentrado situados en el manto, cercanos a la base de la litósfera, que son capaces de calentar la corteza terrestre y producir actividad volcánica.

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

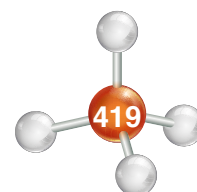
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





Los puntos calientes permanecen fijos en el manto mientras las placas litosféricas se mueven sobre ellos. A medida que se mueve la placa, los volcanes se van enfriando y extinguiendo al quedar cada vez más alejados del foco de calor, que permanece fijo.

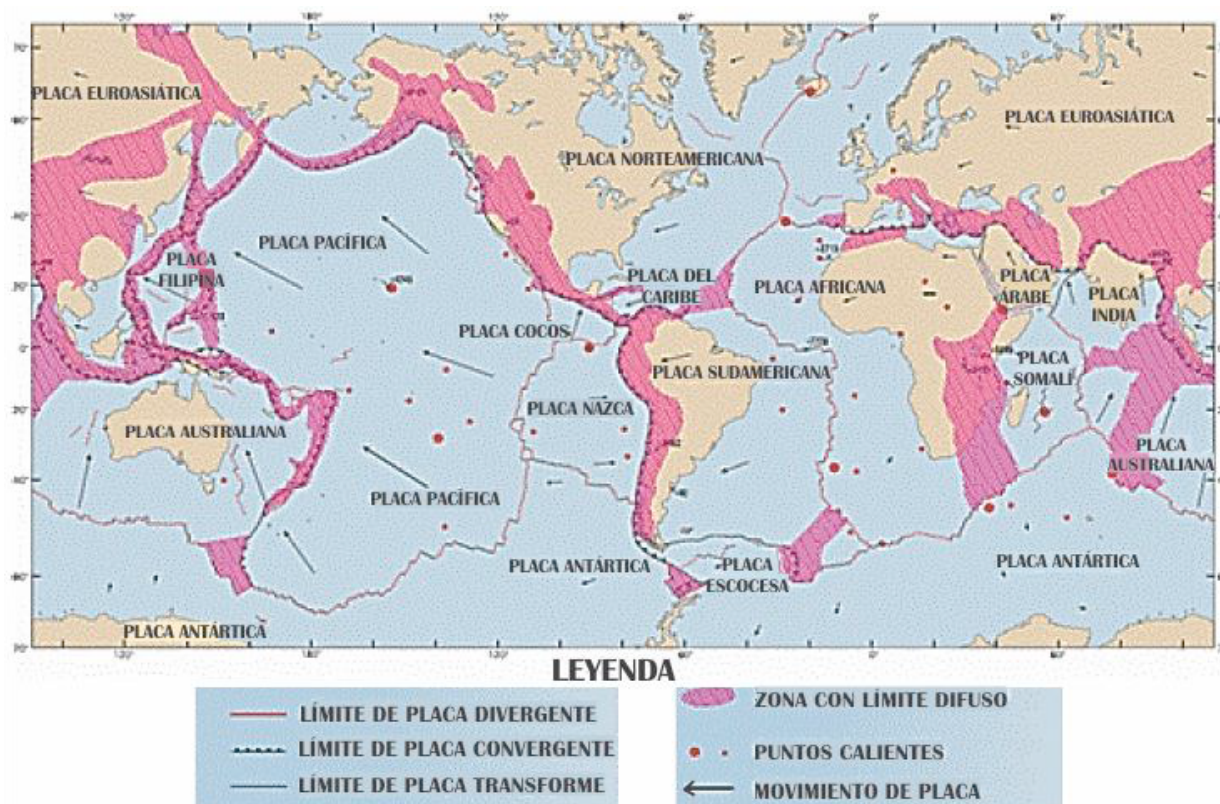


Figura 21.7. Placas litosféricas (Fuente: U.S. Geological Survey, Smithsonian Institution y U. S. Naval Research Laboratory).

Un modelo de yacimiento geotérmico de alta temperatura debe reunir tres condiciones geológicas básicas (Figura 21.8):

- Fuente de calor:** un magma, que puede estar entre 700 y 1 000° C, situado entre 5 y 10 km de la superficie. En determinadas zonas con fuerte actividad tectónica, como los *graben* (bloques hundidos y limitados por fallas normales), el magma se encuentra más cerca de la superficie y puede ascender por fallas.

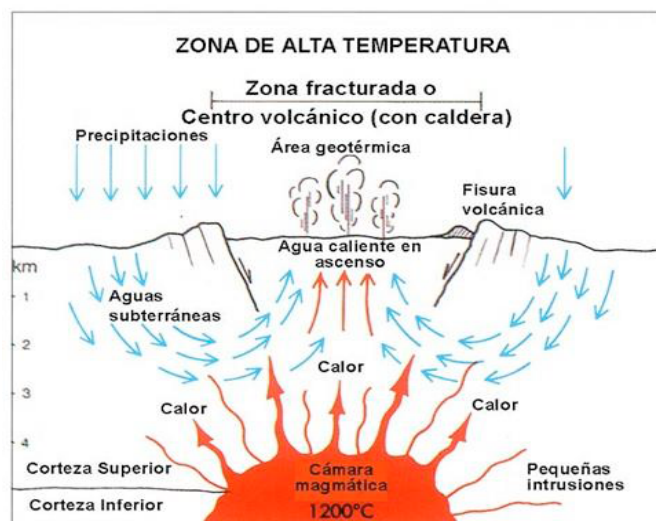


Figura 21.8. Representación esquemática del modelo de un yacimiento geotérmico de alta temperatura.

- Acuífero:** una capa de rocas calientes permeables de las que el agua en circulación pueda extraer calor. Debe estar conectada a un área de recarga superficial, a través de la cual el agua meteórica pueda reemplazar a la que se escapa por las fuentes termales o a la que es extraída mediante los pozos de explotación. El agua, dependiendo de su temperatura y presión,



puede estar en fase líquida o en fase vapor y podrá contener sales disueltas y gases como CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>S, etc.

- c. **Capa impermeable:** situada sobre el acuífero para que mantenga el agua atrapada y la presión del mismo.

Muchos yacimientos de este tipo que se explotan actualmente contienen agua a presión y temperatura elevada, ocasionalmente a 300° C. Generalmente, llevan asociadas manifestaciones en superficie como géiseres, fuentes termales, fumarolas, etc.

Cuando el agua asciende por el pozo de extracción a la superficie, la presión disminuye bruscamente y produce una gran cantidad vapor. Una vez separado el vapor con un separador de fases, se pasa a una turbina para que genere energía eléctrica.

A estos yacimientos se les denomina *de vapor húmedo* por la presencia de agua en fase líquida en el cabezal del pozo.

Si para la presión del yacimiento, la temperatura es superior a la de saturación correspondiente, habrá un sobrecalentamiento sin contenido de agua líquida. En este caso, los yacimientos se llaman *de vapor seco*, los cuales permiten obtener mejores rendimientos en las turbinas generadoras de electricidad.

Dos excepciones del modelo de yacimiento de alta temperatura son los llamados *yacimientos de roca seca caliente* (HDR por sus siglas en inglés), también conocidos como *sistemas geotérmicos estimulados* (EGS en inglés), y los *yacimientos geopresurizados*.

### 21.7.5.1 Yacimientos de roca seca caliente

Un recurso geotérmico es explotable para la producción de energía eléctrica si reúne cuatro condiciones: que no esté a demasiada profundidad, que en el yacimiento en que se encuentra haya calor, rocas permeables y agua suficiente.

De esas condiciones, dos son inherentes: el calor, que lo genera el flujo terrestre, y la profundidad, que debe ser accesible para los equipos de perforación disponibles. Las otras dos, permeabilidad en las rocas y agua en circulación, pueden ser mejoradas por el hombre, de ahí el nombre de Sistemas Geotérmicos Estimulados.

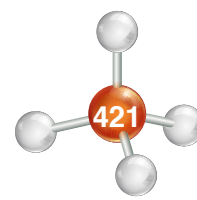
La permeabilidad en las rocas puede ser creada artificialmente inyectando grandes volúmenes de agua a elevada presión por un pozo, para producir fracturación. El proceso, llamado hidrofracturación, o fracturación hidráulica, es usado frecuentemente en la producción de petróleo y gas.

La distribución en profundidad del sistema de fracturas provocado artificialmente se puede modelar utilizando métodos sísmicos de prospección geofísica, con el propósito de determinar la ubicación de un segundo pozo de extracción de agua caliente, que será enviada a una central de ciclo binario para generación de energía eléctrica y, posteriormente, reinyectada al yacimiento.

### 21.7.5.2 Yacimientos geopresurizados

Son otro caso particular de yacimientos de alta temperatura. El agua contenida en el acuífero está sometida a grandes presiones, entre un 40 y un 90% superiores a la presión hidrostática que correspondería a la profundidad en la que se encuentra.

Han sido descubiertos como consecuencia de exploraciones petroleras en cuencas sedimentarias con gradiente geotérmico normal, en la que el agua se encuentra a una profundidad de 6 000 m o mayor y, por lo tanto, a temperaturas superiores a 150° C. Ninguno se encuentra en explotación.







## 21.8 Entalpía

Los recursos geotérmicos pueden ser clasificados por su *entalpía* y/o temperatura y por el tipo de fase predominante.

La entalpía se entiende como la cantidad de energía contenida en una sustancia. Es una medida que, al variar, muestra la cantidad de energía absorbida o liberada por un sistema termodinámico (proporción de energía que un sistema transfiere a su entorno).

Se reconocen los siguientes tipos:

**Entalpía de formación:** Cantidad de calor que es absorbida o es liberada cuando se produce un mol de un compuesto. Es negativa cuando proviene de una reacción exotérmica (libera calor), mientras que es positiva, cuando la reacción es endotérmica (absorbe calor).

**Entalpía de reacción:** Depende de las entalpías de formación y se refiere a la cantidad de calor absorbido o liberado en una reacción química, cuando ésta sucede a presión constante. El valor depende de la presión y temperatura en dicha reacción.

**Entalpía de combustión:** Representa el calor liberado, a presión constante, en el momento de quemar un mol de sustancia. Por lo tanto, se trata de una reacción exotérmica, con variación de entalpía negativa.

**Entalpía estándar:** Aquella referida a 25° C y 1 atm.

**Entalpía de solidificación:** Cantidad de energía liberada para que un mol de sustancia, a temperatura y presión constante, pase de la fase líquida a la fase sólida.

**Entalpía de vaporización:** Energía que debe consumirse para vaporizar un mol de sustancia. Ya que se absorbe energía, se trata de un proceso endotérmico. La variación de la entalpía es positiva.

## 21.9 Clasificación de recursos geotérmicos

La clasificación universal de los recursos energéticos se sustenta en un esquema similar al propuesto por MCKelvey, en 1972, para los recursos minerales, publicado en 1976 por el U.S. Geological Survey y el U.S. Bureau of Mines como "Principles of a Resource / Reserve Clasification for Minerals".

Dicho esquema fue adaptado por Mufler y Cataldi en 1978 para recursos geotérmicos: contempla el mayor o menor grado de conocimiento geológico de los recursos y la viabilidad económica de su exploración (Figura 21.9).

Se considera *base* de recursos accesible a toda la energía térmica

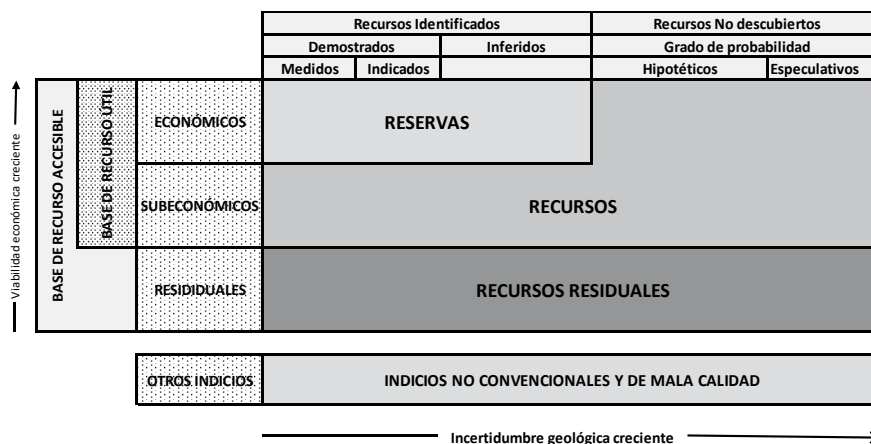
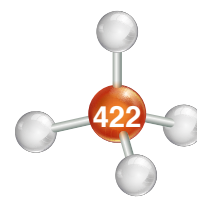


Figura 21.9. Clasificación de recursos geotérmicos (adaptación de Mufler y Cataldi, de la propuesta de MCKelvey, publicada en 1976 por el U. S. Geological Survey y el U. S. Bureau of Mines como "Principles of a Resource /Reserve Clasification for Minerals").





almacenada entre la corteza terrestre y los primeros 5 000 m de profundidad, estimada para una determinada área del planeta y calculada a partir de la temperatura media anual regional. Teóricamente podría ser extraída con la tecnología actual. Las bases pueden ser:

**Base de recursos útil**, fracción que está almacenada en los primeros 3 000 m bajo la superficie terrestre.

**Recursos geotérmicos**, fracción del recurso útil que podría ser explotada entre los próximos 40 a 50 años. Incluye cantidades de recursos que, en el momento de la estimación, son considerados subeconómicos. Algunos autores prolongan el futuro inmediato hasta “menos de 100 años”.

**Reservas geotérmicas**, fracción de los recursos geotérmicos que pueden ser explotados económicamente en los próximos 10 a 20 años.

Dentro de la categoría de recursos geotérmicos es pertinente la distinción entre **recursos no descubiertos** y **recursos identificados**, en función de que su existencia sólo esté postulada; y dentro de la categoría de reservas, o recursos identificados, para los que puede que no existan medios de extracción, o que no estén en actividad, cabe diferenciar entre **inferidos** y **demostrados**, en función del grado de conocimiento geológico.

Los recursos demostrados, a su vez, pueden diferenciarse en **indicados** y **medidos** dependiendo de la precisión con la que se hayan determinado sus dimensiones, forma y profundidad del yacimiento, contenido energético, etc.

Entre las estimaciones de recursos menos optimistas que se han podido integrar figuran las que se muestran en la Tabla 21.1 para el año 2000.

Según estas cifras, poco más de un 0.4% de la inmensa base de recursos accesible se considera como útil, y de ésta, no llega a un 1% lo que se considera recurso geotérmico. Sólo un 10% de los recursos, la parte más accesible, es considerado reserva geotérmica.

La cantidad de reservas puede parecer muy pequeña, sin embargo, ésta es superior al consumo de energía primaria mundial en el año 2001, que fue de 420 EJ. Una tercera parte de esa cantidad puede considerarse de alta temperatura, apropiada para producir energía eléctrica y las otras dos terceras partes, de temperatura inferior a 150° C. La distribución por regiones del planeta para el mismo año es la que se observa en la Tabla 21.2.

La inclusión de un recurso en una u otra categoría es dinámica, cambia con el transcurso del tiempo. Por un lado, el incremento de los precios de la energía, los avances tecnológicos y una mayor exploración de recursos geotérmicos, harán que aumenten las reservas de energía geotérmica en determinadas regiones. Por otro lado, la inflación, el aumento de impuestos, reglamentaciones excesivas y leyes ambientales restrictivas, harán que disminuyan en otras.

CATEGORÍA DE RECURSO	ENERGÍA (EJ)
Base de recursos accesibles	140,000,000
Base de recursos útil	600,000
Recursos geotérmicos	5,000
Reservas geotérmica	500

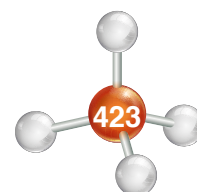
Donde: 1 EJ= 10<sup>18</sup> J

Tabla 21.1. Potencial geotérmico mundial en el año 2000. (Fuente: Geothermal Energy. Clauser, C.2006).

REGIÓN	ENERGÍA (EJ)	TOTAL (%)
América del Norte	26,000,000	18.6
Latinoamérica y Caribe	26,000,000	18.6
Europa Occidental	7,000,000	5.0
Europa Oriental y antigua URSS	23,000,000	16.4
Oriente Medio y África del Norte	6,000,000	4.2
África Subsahariana	17,000,000	12.1
Pacífico Asiático (excepto China)	11,000,000	7.9
China	11,000,000	7.9
Asia Central y Meridional	13,000,000	9.3
TOTAL	140,000,000	100.0

Donde: 1 EJ= 10<sup>18</sup> J

Tabla 21.2. Base de recursos geotérmicos accesibles por regiones en el año 2000. (Fuente: Geothermal Energy. Clauser, C.2006).







Por contradictorio que parezca, cuanto mayor sea el número de explotaciones y cuanto más aumente la producción de energía geotérmica, mayores serán sus reservas. El grado de conocimiento de los recursos mejorará y muchos de éstos adquirirán la condición de reservas.

Por lo anterior, se puede prever que, en los próximos años, a medida que las reservas de los combustibles fósiles se vayan agotando, las de energía geotérmica vayan aumentando; y es de esperar que el número de expertos que cuestionan el carácter renovable de este recurso energético, vaya disminuyendo.

Si la energía geotérmica dejara de explotarse, no sería por agotamiento del recurso, sino por obsolescencia de las instalaciones que se encargaran de extraerlo del subsuelo, por cese de actividad industrial, agrícola, comercial o pública de la empresas u organismos que aprovechan su calor.

### 21.10 Generación de electricidad de origen geotérmico

Aprovechar estos recursos para generar energía eléctrica no es algo nuevo. Las primeras plantas geotermoeléctricas empezaron a funcionar en Italia a principios de la década de los años treinta del siglo XX, en el campo de Larderello (Cataldi, R., 2006). En el continente americano, la primera planta de este tipo se instaló en el campo de Pathé, México, en 1959. Se trata de una unidad de 3.5 MW de capacidad, adquirida en Italia, que entró en operación el 20 de noviembre de 1959. Aunque sólo generó una fracción de su capacidad, estuvo operando hasta 1973, año en que fue desmantelada. Actualmente se exhibe como pieza de museo en las instalaciones del campo geotérmico de Los Azufres, estado de Michoacán, operado por la Comisión Federal de Electricidad (CFE).

Actualmente 27 países hacen uso de la geotermia para generar electricidad, la mayoría de los cuales están ubicados cerca de los límites entre diversas placas tectónicas. La capacidad geotermoeléctrica instalada actual, con datos a junio de 2007, es de 9 mil 300 megawatts (MW) (Tabla 21.3). México ocupa el tercer lugar mundial, después de Estados Unidos y Filipinas, representando más del 10% de la capacidad mundial.

País	Capacidad (MW)
Estados Unidos	2,851
Filipinas	1,980
México	958
Indonesia	797
Italia	790
Japón	535
Nueva Zelanda	450
Islandia	202
Costa Rica	163
El Salvador	151
Kenya	127
Nicaragua	87
Rusia	79
Guatemala	33
China	28
Turquía	20
Portugal (Islas Azores)	17
Francia (Isla Guadalupe)	15
Otros	20
Total	9,303

Tabla 21.3. Capacidad geotermoeléctrica en el mundo (junio de 2007).

Hay varias maneras de generar electricidad con fluidos geotérmicos. La más sencilla consiste en utilizar unidades a contrapresión en las que el vapor se descarga directamente a la atmósfera después de que se le ha hecho pasar por la turbina (Figura 21.10-a). Otra emplea una unidad a condensación en la cual el vapor, después de pasar por la turbina, pasa a un condensador que trabaja a una

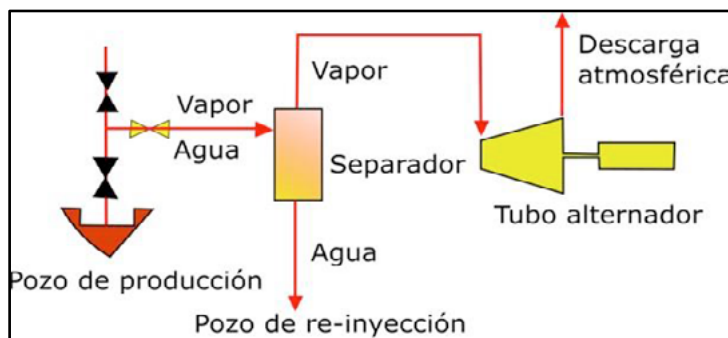


Figura 21.10-a. Esquema de generación geotermoeléctrica comercialmente aprovechable. Planta a contrapresión. (Tomada del Manual de Geotermia).



presión menor que la atmosférica (Figura 21.10-b). Las unidades a contrapresión son más baratas ya que carecen de condensador y torre de enfriamiento, pero menos eficientes pues requieren de 12 toneladas de vapor, aproximadamente, para generar un megawatt-hora (MWh). Las unidades a condensación ameritan mayor inversión, pero son más eficientes ya que necesitan de 8 toneladas de vapor, aproximadamente, por MWh generado.

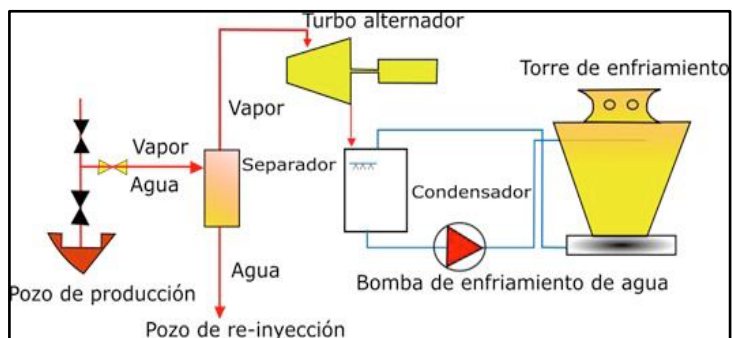


Figura 21.10-b. Esquema de generación geotermoeléctrica comercialmente aprovechable. Planta a condensación. (Tomada del Manual de Geotermia).

Un tercer tipo de unidad geotermoeléctrica es la de **ciclo binario**. En ésta se utiliza un intercambiador de calor para que el fluido geotérmico (agua o vapor) caliente a un fluido de trabajo con punto de ebullición inferior al del agua. Es justamente este fluido el que se hace pasar por la turbina para ser posteriormente condensado y vuelto a pasar por el intercambiador, en un proceso cíclico y continuo (Figura 21.10-C). Este arreglo es el más caro, pero permite aprovechar fluidos geotérmicos de temperaturas inferiores que, de otro modo, tal vez no podrían utilizarse para generar electricidad.

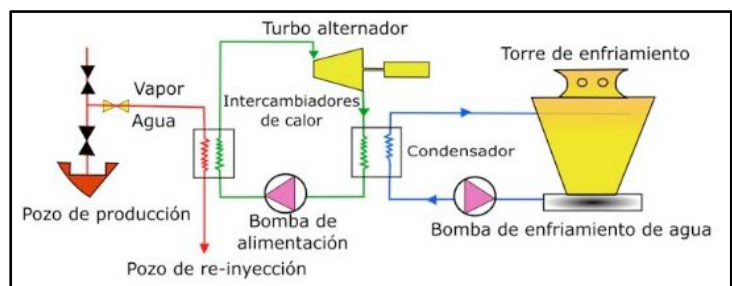


Figura 21.10-c. Esquema de generación geotermoeléctrica comercialmente aprovechable. Planta de ciclo binario. (Tomada del Manual de Geotermia).

Los tres tipos de unidades geotermoeléctricas se emplean rutinariamente para generar energía eléctrica de manera comercial, tanto en México como en el resto del mundo.

## 21.11 Campos geotérmicos en México

### 21.11.1 Recursos de roca seca caliente

Para estimar el potencial geotérmico de nuestro territorio, a partir de recursos de roca seca caliente que podrían aprovecharse para generar energía eléctrica con tecnologías de mejora a través de los llamados sistemas geotérmicos mejorados (EGS), debe partirse de una estimación de la energía térmica almacenada en el subsuelo del país.

En el mundo, la energía térmica total almacenada en la litósfera, es decir, hasta una profundidad media de 50 km, ha sido estimada en  $5.4 \times 10^9$  EJ (Dickson y Fanelli, 2003). Las dos fuentes últimas de esta energía son, por un lado, el flujo de calor proveniente del núcleo y manto terrestres, y por otro el decaimiento de isótopos radiactivos (básicamente uranio, torio y potasio) contenidos en las propias rocas de la litósfera. El calor se transfiere del interior de la Tierra hacia la superficie por conducción y, en el manto, por corrientes de convección, a una tasa promedio estimada en 1400 EJ anuales. Debajo de los continentes esta tasa es de unos 315 EJ/año, lo que resulta en un flujo unitario de calor promedio estimado entre 59 y 65 miliwatts por cada metro cuadrado ( $mW/m^2$ ) de superficie continental (Steffanson, 2005; Tester et al., 2006).







Como se observa en ella, el flujo térmico varía entre un mínimo de 13 y un máximo de 191 mW/m<sup>2</sup> y, aunque los datos están demasiado dispersos, pueden identificarse algunas regiones con flujos de calor más elevados.

Prol y Juárez (1986, citado por Prol-Ledesma, 1991) utilizaron datos de temperaturas de fondo obtenidos con el geotermómetro de sílice, calculados para 326 manantiales termales en México, para estimar flujos de calor, sin tomar en cuenta muestras de los campos geotérmicos, a fin de evitar desviaciones locales. En la Figura 21.12 se presentan las temperaturas de equilibrio de fondo calculadas con este geotermómetro y expresadas en grados centígrados, así como los valores de flujo de calor expresados en mW/m<sup>2</sup>.

Pueden definirse tres regiones con flujos de calor superiores a 100 mW/m<sup>2</sup>, consideradas, por tanto, como anomalías térmicas. La zona norte podría relacionarse con la propuesta prolongación meridional del Rift del Río Grande hacia México. La zona anómala central parece estar asociada con la Faja Volcánica Mexicana (y probablemente con el Graben de Tepic-Zacoalco, que también ha sido postulado como una incipiente zona de rift). La zona con valores mayores de 100 mW/m<sup>2</sup>, definida en la parte sur del país, estaría relacionada con la Faja Volcánica de Centroamérica (Prol-Ledesma, 1991).

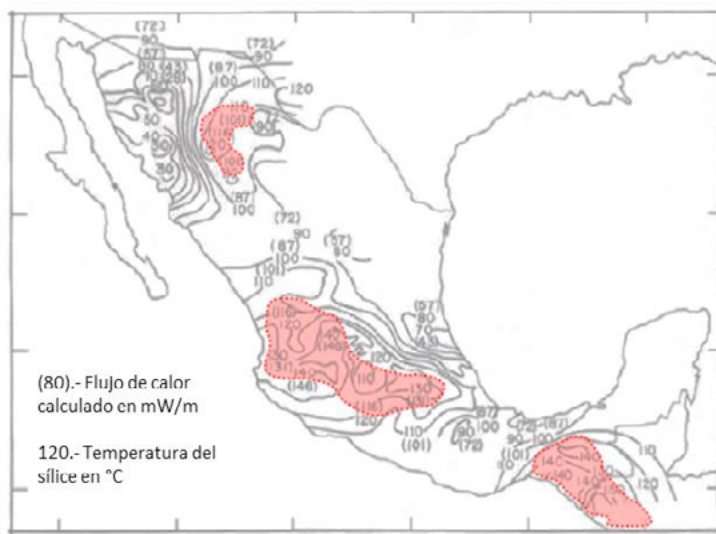


Figura 21.12. Temperaturas de fondo obtenidas con el geotermómetro de sílice, flujo de calor estimado y zonas anómalas (Modificada de Prol-Ledesma, 1991).

En cuanto a la estimación de flujo de calor mediante la relación isotópica del helio, Polak et al. (1985) tomaron 22 muestras de agua termal provenientes de manantiales y de algunos pozos geotérmicos ubicados en la porción central del país (provincia de la Faja Volcánica Mexicana), y determinaron la relación isotópica en cada una, aplicando la ecuación empírica. Sus resultados se observan en la Figura 21.13. Las muestras fueron tomadas de pozos de los campos de Los Humeros, Los Azufres y La Primavera y de algunas otras zonas geotérmicas del área. Todos los valores de flujo de calor estimados por este método son superiores a 70 mW/m<sup>2</sup>, destacando el

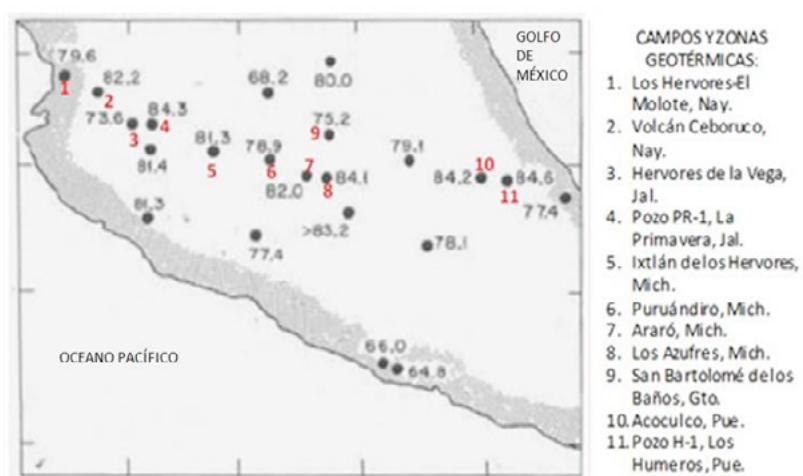


Figura 21.13. Estimación de flujo de calor en mW/m<sup>2</sup> en la parte central de México empleando la relación isotópica del helio (modificada de Polak et al., 1985, y García, 1989).



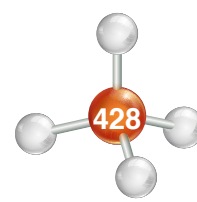
sitio marcado con el número 10, que corresponde a la zona geotérmica de Acoculco, cuyo valor es comparable con los de los campos geotérmicos en explotación.

Los valores disponibles de flujo de calor en México no son suficientes como para elaborar un plano completo y definir diferentes provincias, pero es evidente que todos los métodos identifican ciertas regiones con flujos de calor superiores a la media. Una de ellas, ubicada hacia la parte norte del país, identificada tanto en la Figura 21.11 como en la 21.12 con valores de flujos de calor del orden de  $100 \text{ mW/m}^2$ , podría relacionarse con la probable prolongación hacia México del Rift del Río Grande, que en Estados Unidos presenta valores altos de flujo de calor. Otra zona anómala es la Faja Volcánica Mexicana, con valores iguales o superiores a los  $100 \text{ mW/m}^2$ , de acuerdo con el método convencional y el del geotermómetro de sílice, y mayores de  $70 \text{ mW/m}^2$ , según el del cociente isotópico de helio. Finalmente, la zona sur, con valores del orden de  $100 \text{ mW/m}^2$ , donde sólo se han realizado estimaciones con el geotermómetro de sílice, parece relacionarse con el vulcanismo de la trinchera centroamericana. Otra zona de probables valores altos que parece señalar el método convencional es la de la porción noroeste, la cual ha sido relacionada con la provincia de Cuencas y Sierras que en Estados Unidos conocida como Basin and Range.

Un mapa de flujo de calor es el punto de partida para estimar la energía térmica almacenada en el subsuelo de una región determinada o de un país.

En México se carece de la información básica para realizar estudios más completos; sin embargo, en 1978 el Electric Power Research Institute (EPRI), con sede en Palo Alto, California, Estados Unidos, preparó un reporte especial para la Comisión de Conservación de la Conferencia Mundial de Energía (WEC: World Energy Conference). Como primera parte de ese estudio, el EPRI estimó la energía térmica almacenada en el subsuelo de los países miembros de la WEC y de muchos no miembros, hasta una profundidad de 3 km. Para su estimación, el EPRI partió de las premisas siguientes (EPRI, 1978):

- Todas las áreas continentales “normales” del mundo tienen un gradiente geotérmico vertical de  $25^\circ \text{ C}$  por km de profundidad.
- Hay ciertas “fajas geotérmicas” en el mundo donde el gradiente térmico vertical es más alto. Están asociadas, esencialmente, con los límites de las placas tectónicas donde ocurren también fenómenos sísmicos y volcánicos. Se definió para cada país, si éste se hallaba completa o parcialmente dentro de algunas de esas fajas geotérmicas. En el último caso qué porcentaje de su extensión territorial quedaba dentro.
- Del área total de cada país quedaba dentro de alguna o algunas de esas fajas geotérmicas, se estimó que el 90% de la misma tenía un gradiente geotérmico de  $40^\circ \text{ C/km}$  mientras que en el 10% restante el gradiente era del doble ( $80^\circ \text{ C/km}$ ).
- La temperatura ambiental promedio se asumió en  $15^\circ \text{ C}$ .
- Se establecieron cuatro rangos de temperatura del subsuelo: menos de  $100^\circ \text{ C}$ ,  $100\text{-}150^\circ \text{ C}$ ,  $150\text{-}250^\circ \text{ C}$  y más de  $250^\circ \text{ C}$ .
- Se estableció un calor específico volumétrico ( $C_v$ ) promedio de  $2.5 \text{ J/cm}^3 \text{ }^\circ \text{ C}$ .
- La energía térmica almacenada para cierto rango de temperatura se definió por la ecuación:  $Q = (A) (H) (C_v) (T-15)$ , donde  $Q$  es la energía térmica,  $A$  es el área,  $H$  el espesor,  $C_v$  el calor específico y  $T$  la temperatura. Si  $A$  se expresa en  $\text{cm}^2$  y  $H$  en  $\text{cm}$ , la ecuación se convierte en:  $Q = (2.5) (A) (H) (T-15) \text{ J}$ .







- Se asumió que, en todos los rangos de temperatura, un 20% de la energía térmica estimada estaría almacenada en el agua y vapor atrapado en la roca y el 80% en la matriz rocosa.

Para el caso de México, el EPRI asumió que el 60% de su extensión territorial, de 2 millones de km<sup>2</sup>, cae en una o más de las “fajas geotérmicas” definidas y obtuvo las estimaciones siguientes (Tabla 21.4):

Rango de temperatura:	< 100° C	100 - 150° C	150-250° C	> 250° C	Total
Energía térmica en EJ:	450,000	260,000	67,000	4,200	781,200

Tabla 21.4. Calor total almacenado a 3 km de profundidad en México (EPRI, 1978).

Conforme a las consideraciones del EPRI, de ese total, un 20% correspondería a recursos hidrotermales (calor almacenado en agua y vapor de agua) y el 80% restante a recursos de roca seca caliente, que actualmente podrían desarrollarse con tecnologías de EGS. Por lo tanto, si se excluyen los recursos hidrotermales, el calor almacenado total se reduce a 629,960 EJ. Por otro lado, los recursos con temperatura menor de 100° C difícilmente podrían utilizarse para generar energía eléctrica, aunque son aprovechables en aplicaciones directas que requieran calor. Tomando en cuenta los recursos con temperatura superior a 100° C, el calor almacenado en el país, hasta una profundidad de 3 km, sería:  $(260,000 + 67,000 + 4,200) (0.8) = 264,960$  EJ.

Para convertir la energía térmica almacenada a un potencial eléctrico probable, debe estimarse primero la cantidad de calor que podría ser recuperado en superficie. El estudio del MIT para Estados Unidos (Tester et al., 2006) estimó que, recuperando sólo el 2% de la energía térmica almacenada en el subsuelo de ese país entre 3 y 10 km de profundidad, se podría instalar una capacidad eléctrica total de 1249 GW, asumiendo que se instalarían plantas de ciclo binario con diversas eficiencias del ciclo térmico, en función de la temperatura del recurso, un factor de planta promedio anual del 90% y una vida útil de 30 años. Si se utilizaran las mismas consideraciones en México, con los 264,960 EJ de energía térmica en el subsuelo a 3 km de profundidad, se podría instalar una capacidad de 24.7 GW eléctricos.

No todas las premisas del estudio del MIT, aplicadas al caso de México son del todo válidas, primero por la ausencia de datos de flujo de calor en el país; además, porque para Estados Unidos incluyó recursos con temperaturas de 150° C en adelante y profundidades entre 3 y 10 km, mientras que los datos del EPRI empleados para México consideran recursos con temperatura mayor de 100° C y profundidades entre 0 y 3 km. Sin embargo, el potencial técnico obtenido puede ser una primera aproximación.

Se puede concluir que el potencial geotermoeléctrico de México con recursos de roca seca caliente, susceptible de ser desarrollado con tecnologías de sistemas geotérmicos mejorados (EGS), es del orden de los 24,700 MW para una profundidad máxima de 3,000 m. Este potencial técnico resulta 25 veces superior a la capacidad geotermoeléctrica instalada actual en el país, y 48%, aproximadamente, superior a la capacidad eléctrica total instalada en México para el servicio público.

### 21.11.2 Recursos Hidrotermales submarinos

El movimiento de las placas tectónicas produce el fenómeno conocido como *subducción* de una placa debajo de otra, originando la formación de cuerpos magmáticos que pueden dar lugar a procesos volcánicos en superficie y, por lo tanto, a yacimientos geotérmicos de tipo hidrotermal en los continentes, donde las condiciones de almacenamiento de agua y permeabilidad del subsuelo lo permiten. Un fenómeno poco estudiado es el posible aprovechamiento del calor de la corteza terrestre que sube hasta el lecho marino cuando hay separación de placas. Según algunos



investigadores (Baker and German, 2004) en el lecho marino existen alrededor de 67,000 km de grietas o cordilleras volcánicas submarinas en cuya cima está fluyendo continuamente lava, provocando que el lecho marino se caliente y se emiten corrientes verticales de agua muy caliente asociada a gases y minerales.

Hiriart et al. (2010) realizaron una estimación de la energía térmica que es emitida en el mundo a través de estas ventilas y del flujo de energía. Para cuantificar la energía eléctrica que se podría obtener de esas ventilas hidrotermales submarinas, sin perforar en zonas cercanas a ellas, calcularon una eficiencia de transformación de alrededor del 4%, tomando en cuenta un aprovechamiento de sólo el 10% del calor emitido por la ventila y transformándolo en electricidad mediante una planta submarina, con una eficiencia global del 40%. Es decir, de cada MW térmico de una ventila se obtendrían 40 kW eléctricos. Con estas consideraciones se han analizado ventilas de 1 m de largo por 10 cm de ancho que emiten agua caliente a 250° C a una velocidad de 1m/s y se ha calculado que la potencia térmica de estas ventilas podría ser de unos 100 MW térmicos por metro. Así, podrían extraerse unos 4 MW eléctricos por metro lineal.

Por su parte, Canet et al. (2005) y Prol-Ledesma et al. (2008) han descrito las ventilas detectadas en el Golfo de California, aunque no han precisado todavía su extensión ni el flujo de calor.

La siguiente es una estimación preliminar sobre el potencial de energía eléctrica que eventualmente se podría obtener de esta fuente natural submarina en México, aunque no se tenga cuantificada con precisión su extensión. Conservadoramente, se supone una extensión de 10 km para la Fosa de Wagner. Si sólo se aprovechara el 1% de la energía térmica que fluye en esa fosa, se podrían generar unos 100 MW eléctricos. En el caso de la Fosa de Guaymas, donde la extensión y temperatura de las ventilas es mucho mayor, se podrían generar unos 500 MW eléctricos. A esto habría que sumarle otro tanto adicional por todas las otras fuentes de ventilas submarinas aún no cuantificadas, como Canal Ballenas y otras fuera del Golfo frente a Punta Mita y a La Bufadora.

Tentativamente, se estima que el potencial geotermoeléctrico con recursos hidrotermales submarinos en el Golfo de California y en la plataforma continental de México es del orden de 1200 MW.

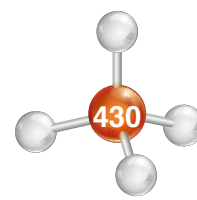
### 21.11.3 Reseña histórica de la geotermia como fuente alterna

La generación de energía eléctrica inició en México a fines del siglo XIX. La primera planta generadora que se instaló en el país (1879) estuvo en León, Guanajuato, y era utilizada por la fábrica textil "La Americana". Casi inmediatamente se extendió esta forma de generar electricidad dentro de la producción minera y, ocasionalmente, para la iluminación residencial y pública.

En 1889 operaba la primera planta hidroeléctrica en Batopilas (Chihuahua), la cual extendió sus redes de distribución hacia mercados urbanos y comerciales donde la población tenía mayor capacidad económica.

No obstante, durante el régimen de Porfirio Díaz se otorgó al sector eléctrico el carácter de servicio público, colocándose las primeras 40 lámparas "de arco" en la Plaza de la Constitución, cien más en la Alameda Central y comenzó la iluminación de la entonces calle de Reforma y de algunas otras vías de la Ciudad de México.

Algunas compañías internacionales con gran capacidad vinieron a crear filiales, como The Mexican Light and Power Company, de origen canadiense, en el centro del país; el consorcio The American and Foreign Power Company, con tres sistemas interconectados en el norte de México, y la Compañía Eléctrica de Chapala, en el occidente.





A inicios del siglo XX, México contaba con una capacidad de 31 MW, propiedad de empresas privadas. Para 1910 eran 50 MW, de los cuales 80% los generaba The Mexican Light and Power Company, con el primer gran proyecto hidroeléctrico: la planta Necaxa, en Puebla. Las tres compañías eléctricas tenían las concesiones e instalaciones de la mayor parte de las pequeñas plantas que sólo funcionaban en sus regiones.

En ese período se dio el primer esfuerzo para ordenar la industria eléctrica con la creación de la Comisión Nacional para el Fomento y Control de la Industria de Generación y Fuerza, conocida posteriormente como Comisión Nacional de Fuerza Motriz.

Fue el 2 de diciembre de 1933 cuando se decretó que la generación y distribución de electricidad son actividades de utilidad pública.

En 1937, México tenía 18.3 millones de habitantes, de los cuales únicamente siete millones contaban con electricidad, proporcionada con serias dificultades por tres empresas privadas.

En ese momento las interrupciones de luz eran constantes y las tarifas muy elevadas, debido a que esas empresas se enfocaban a los mercados urbanos más redituables, sin contemplar a las poblaciones rurales, donde habitaba más de 62% de la población. La capacidad instalada de generación eléctrica en el país era de 629 MW.

Para dar respuesta a esa situación que no permitía el desarrollo del país, el gobierno federal creó, el 14 de agosto de 1937, la Comisión Federal de Electricidad (CFE), que tendría por objeto organizar y dirigir un sistema nacional de generación, transmisión y distribución de energía eléctrica, basado en principios técnicos y económicos, sin propósitos de lucro y con la finalidad de obtener con un costo mínimo, el mayor rendimiento posible en beneficio de los intereses generales. (Ley promulgada en la Ciudad de Mérida, Yucatán el 14 de agosto de 1937 y publicada en el Diario Oficial de la Federación el 24 de agosto de 1937).

La CFE comenzó a construir plantas generadoras y a ampliar las redes de transmisión y distribución, beneficiando a más mexicanos al posibilitar el bombeo de agua de riego y la molienda, así como mayor alumbrado público y electrificación de comunidades.

Los primeros proyectos de generación de energía eléctrica de la CFE se realizaron en Teloloapan (Guerrero), Pátzcuaro (Michoacán), Suchiate y Xía (Oaxaca), y Ures y Altar (Sonora).

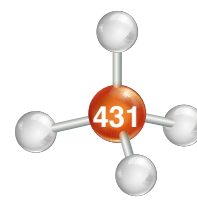
El primer gran proyecto hidroeléctrico se inició en 1938 con la construcción de los canales, caminos y carreteras de lo que después sería el Sistema Hidroeléctrico Ixtapantongo, en el Estado de México, posteriormente nombrado Sistema Hidroeléctrico Miguel Alemán.

En 1938 la CFE tenía apenas una capacidad de 64 kW, misma que, en ocho años, aumentó hasta alcanzar 45,594 kW. Entonces, las compañías privadas dejaron de invertir y la CFE se vio obligada a generar energía para que éstas la distribuyeran en sus redes, mediante la reventa.

Hacia 1960 la CFE aportaba ya el 54% de los 2,308 MW de capacidad instalada, la empresa Mexican Light el 25%, la American and Foreign el 12%, y el resto de las compañías 9%.

Sin embargo, a pesar de los esfuerzos de generación y electrificación, para esas fechas apenas 44% de la población contaba con electricidad. Por eso el presidente Adolfo López Mateos decidió nacionalizar la industria eléctrica, el 27 de septiembre de 1960.

A partir de entonces se comenzó a integrar el Sistema Eléctrico Nacional, extendiendo la cobertura del suministro y acelerando la industrialización. El estado mexicano adquirió los bienes e





instalaciones de las compañías privadas, las cuales operaban con serias deficiencias por falta de inversión y problemas laborales.

En 1961 la capacidad total instalada en el país ascendía a 3,250 MW. La CFE vendía 25% de la energía que producía y su participación en la propiedad de centrales generadoras de electricidad pasó de 0 a 54%.

En esa década la inversión pública se destinó en más de 50% a obras de infraestructura. Se construyeron importantes centros generadores, entre ellos los de Infiernillo y Temascal, y se instalaron otras plantas generadoras alcanzando, en 1971, una capacidad instalada de 7,874 MW.

Al finalizar esa década se superó el reto de sostener el ritmo de crecimiento al instalarse, entre 1970 y 1980, centrales generadoras que dieron una capacidad instalada de 17,360 MW.

En sus inicios, la industria eléctrica mexicana operaba varios sistemas aislados, con características técnicas diferentes, llegando a coexistir casi 30 voltajes de distribución, siete de alta tensión para líneas de transmisión y dos frecuencias eléctricas de 50 y 60 Hertz.

Esta situación dificultaba el suministro de electricidad, por lo que la CFE definió y unificó los criterios técnicos y económicos del Sistema Eléctrico Nacional, normalizando los voltajes de operación, con la finalidad de estandarizar los equipos, reducir sus costos y los tiempos de fabricación, almacenaje e inventariado. Posteriormente se unificaron las frecuencias a 60 Hertz y la CFE integró los sistemas de transmisión en el Sistema Interconectado Nacional.

En los años 80 el crecimiento de la infraestructura eléctrica fue menor que en la década anterior, principalmente por la disminución en la asignación de recursos a la CFE. No obstante, en 1991, la capacidad instalada ascendió a 26,797 MW.

A principios del año 2000 existía ya una capacidad instalada de generación de 35,385 MW, cobertura del servicio eléctrico del 94.70% a nivel nacional, una red de transmisión y distribución de 614,653 km, lo que equivale a más de 15 vueltas completas a la Tierra y más de 18.6 millones de usuarios, incorporando casi un millón cada año.

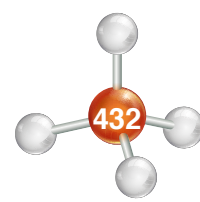
A partir octubre de 2009, la CFE es la encargada de brindar el servicio eléctrico en todo el país.

### 21.12 Impacto ambiental del uso de la geotermia

Utilizar recursos geotérmicos para generar energía eléctrica es una de las maneras que menos daño hacen al ambiente. En la Tabla 21.5 se reporta la emisión a la atmósfera de diversos gases que ocasiona la generación de un megawatt-hora (MWh) de energía eléctrica de acuerdo con el tipo de central en la que se produce la electricidad. El uso de vapor geotérmico en unidades geotermoeléctricas, ejemplificadas con las del campo geotérmico de Los Azufres, evita la emisión de óxidos de nitrógeno y de azufre a la atmósfera, que son los precursores de la lluvia ácida. También, se observa que las unidades geotermoeléctricas emiten una cantidad de dióxido de carbono, el principal gas de efecto invernadero y responsable del fenómeno de calentamiento global, mucho menor que la emitida por las centrales que emplean combustibles convencionales y fósiles: el uso del vapor geotérmico permite que por cada MWh generado se emita a la atmósfera sólo un 22% de la cantidad que emite una planta carboeléctrica, un 29% de la

Centrales termoeléctricas a base de:	Emisiones a la atmósfera en kg/MWh			
	NO <sub>x</sub>	SO <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> S
Carbón, promedio	1.96	4.77	994.71	0.00
Petróleo, promedio	1.82	5.45	759.09	0.00
Gas natural, promedio	1.34	0.01	550.25	0.00
Vapor geotérmico, unidades de Los Azufres	0.00	0.00	221.19	2.92

Tabla 21.5. Emisiones a la atmósfera por megawatt-hora generado.







que emite una planta a base de petróleo y un 40% de la que emite una central a base de gas natural. Finalmente, la cantidad de ácido sulfhídrico que se emite a la atmósfera, y que no producen plantas a base de combustibles fósiles, está dentro de límites de seguridad internacionales y no implica mayor impacto al ambiente más allá de su mal olor característico.

Es evidente que el uso de vapor geotérmico para la generación de electricidad reduce el impacto ambiental que esta actividad provoca comparado con cualquier otra tecnología, a excepción, probablemente, de las plantas hidroeléctricas y eololéctricas. Además, el vapor geotérmico es un recurso natural renovable para todo efecto práctico, mientras que las plantas de generación termoeléctrica convencional utilizan carbón, petróleo o sus derivados y gas natural, que son recursos fósiles no renovables.

Los impactos ambientales ocasionados por el uso de la geotermia para generar electricidad pertenecen a cuatro grupos: emisiones de gases a la atmósfera, desechos líquidos, desechos sólidos y ruido (Figura 21.14).

Las emisiones gaseosas son vapor de agua en más de un 95% en peso, y del 5% restante, más del 90% es dióxido de carbono, cuya cantidad es del orden de una quinta parte de la que emite una planta termoeléctrica convencional para generar la misma cantidad de energía eléctrica.

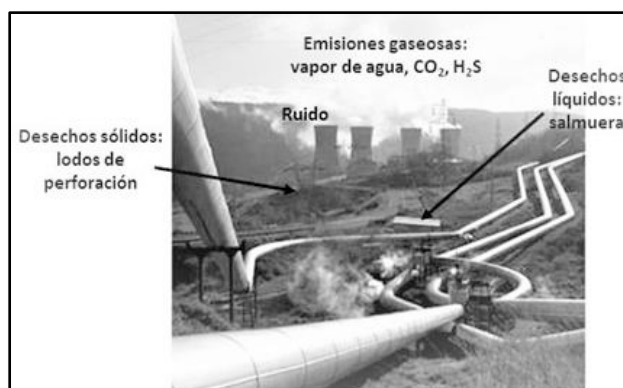


Figura 21.14. Impactos ambientales causados por el uso de la geotermia para generar electricidad.

Otro gas contaminante es el ácido sulfhídrico, cuyas emisiones se encuentran por debajo de los límites establecidos en normas internacionales (en México no existe norma específica para este gas). La CFE utiliza como norma la establecida para los campos geotérmicos de Nueva Zelanda, que es la más estricta a nivel internacional, la cual establece un límite de 0,05 partes por millón de H<sub>2</sub>S como promedio horario. En todos los campos mexicanos operan estaciones para medición del H<sub>2</sub>S en el aire, que toman lecturas las 24 horas del día, los 365 días del año.

Los desechos líquidos del proceso de suministro de vapor son las salmueras geotérmicas, agua que se separa de la mezcla extraída de los pozos del subsuelo. Se trata de agua salina impropia para usos domésticos o agropecuarios, por lo que se regresa al yacimiento a través de pozos inyectoros perforados expresamente para ello.

Adicionalmente, en todos los campos geotérmicos mexicanos se muestrea y analiza el agua de los manantiales termales o fríos dentro del campo y en su periferia, para asegurarse de que las medidas tomadas para evitar contaminar a los acuíferos someros están funcionando adecuadamente. Generalmente el análisis químico incluye la determinación del pH, alcalinidad, conductividad eléctrica y determinación de cloruros, boro, bicarbonatos, sílice, sulfatos, sodio, potasio, litio, rubidio, cesio, calcio, magnesio y arsénico. Los resultados de los análisis indican que no ha existido contaminación de los acuíferos someros debido a la explotación de los yacimientos geotérmicos.

Los desechos sólidos existen únicamente durante la perforación de los pozos. Se trata de los residuos de los lodos de perforación, en su mayor parte arcillas bentoníticas inertes, que deben ser tratados de acuerdo con lo indicado en la norma ambiental respectiva, ya que la perforación de todo tipo de pozos deberá estar perfectamente regulada por la Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales (SEMARNAT). La Norma Oficial Mexicana NOM-003-CNA-1996 que se





presenta mas adelante en el apéndice C, describe los requisitos para la construcción de pozos de extracción de agua para prevenir la contaminación de acuíferos.

En lo referente al ruido, las principales fuentes emisoras son la descarga de los pozos, y el que producen las turbinas que carecen de condensador. Para reducir su nivel, la CFE ha desarrollado diferentes tipos de silenciadores: inclusive, cuenta con una patente para un tipo específico, el cual reduce el ruido hasta en un 80% a una distancia de 3 m de la fuente emisora, y hasta en un 74% a una distancia de 50 m. Los silenciadores logran que el ruido quede dentro del límite permitido por la Secretaría del Trabajo y Previsión Social para jornadas de trabajo de 8 horas, que es de 90 decibeles.

## 21.13 Técnicas de exploración de los recursos geotérmicos

### 21.13.1 Geológicas

La exploración, ya sea regional o de detalle, debe iniciar con una buena cartografía de la zona. Esta cartografía incluye información de la secuencia litológica y vulcanológica, información estructural (fallas y fracturas, campo de esfuerzos), topográfica, hidrotermal (manifestaciones superficiales, áreas de alteración), radiométrica (emisión de radiación térmica del suelo) y mapeo de emisión de gases del suelo ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ , Hg; Rd, B). Con base en la cartografía, se pueden elaborar modelos geológicos preliminares del subsuelo que sirvan de guía en los subsecuentes estados de la exploración.

Las herramientas disponibles incluyen:

#### a) Imágenes de satélite

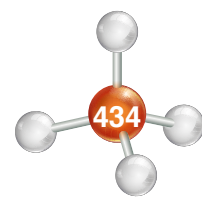
Las imágenes de satélite abarcan grandes extensiones y proporcionan información de la superficie de terreno. La resolución de una imagen tiene cuatro aspectos: espacial, espectral, radiométrica y temporal. La primera se refiere al tamaño de pixel de la imagen que representa al objeto o área mínima que puede ser observada; la segunda, al rango de frecuencias discretas del espectro electromagnético que mide el sensor; la tercera, a los niveles de brillantez o escalas de grises que el sistema de detectores puede medir y la cuarta, a la periodicidad con que el satélite obtiene imágenes de un mismo sitio.

Los satélites que proporcionan estos servicios son: GeoEye, Digital Globe, Spot Image y EROS (Earth Resources Observation Satellites) y Landsat.

Las principales tecnologías para la obtención de imágenes incluyen sensores multiespectrales, hiperespectrales, pancromáticos, tecnología LIDAR (Light Detection And Ranging) y ASTER (Advanced Spaceborne Thermal Emission and Reflection Radiometers). Con éstas, se obtienen imágenes en diferentes frecuencias del espectro electromagnético que, combinadas entre sí, resaltan diferentes rasgos superficiales, como pueden ser fallas, alineamientos y zonas de alteración hidrotermal. Con esta información se pueden elaborar planos geológicos preliminares que sirvan de apoyo a la exploración sobre el terreno, así como modelos digitales de elevación. En particular, la tecnología ASTER es útil para realizar mapeos de temperatura, emisividad y reflectancia. En algunas zonas se ha utilizado la tecnología hiperespectral (cobertura de un rango del espectro electromagnético con un número grande de bandas discretas) para detectar variaciones en la cobertura vegetal que pudieran relacionarse con sitios de descarga de gases de origen hidrotermal.

#### b) Sistemas de posicionamiento global (GPS)

Esta tecnología está ampliamente comercializada. Posiciona de manera fácil y rápida los rasgos o sitios de interés, observados durante un levantamiento de terreno y facilita la elaboración de





planos topográficos de gran resolución. Esta información puede usarse de inmediato en la elaboración de cartografía con Sistemas de Información Geográfica (GIS)

#### c) Modelos digitales de elevación del terreno (MDE)

Estos modelos son útiles para la elaboración de mapas, mediante el uso de Sistemas de Información Geográfica. Los modelos son construidos a partir de fotogrametría o de técnicas de percepción remota como LIDAR o ISAR (Inverse Synthetic Aperture Radar). En México el Instituto Nacional de Estadística y Geografía (INEGI) es el principal proveedor.

En geología estructural, los mapas altimétricos y de relieve sombreado (o iluminación artificial) son muy útiles para identificar fallas, alineamientos y diferentes formas o rasgos geológicos.

#### d) Mapeadores térmicos

Dentro de la gran variedad de sensores remotos, existe un grupo que detecta frecuencias del infrarrojo que incluyen la radiación térmica de objetos a temperaturas ambientales. Esta tecnología puede usarse para identificar anomalías térmicas en la superficie del terreno, que pudieran estar asociadas a descargas de acuíferos hidrotermales. La información obtenida de las imágenes debe ser validada con observaciones y mediciones en el terreno, pues siempre existe cierta ambigüedad en la información. Por ejemplo, los cuerpos de agua superficial, debido a su gran reflectancia, pueden confundirse con puntos de radiación asociada a una temperatura anómala.

#### e) Modelado geológico

En el mercado existe una variedad de programas (software) destinados al modelado geológico. Uno de los más completos es la familia PETREL, comercializada por Schlumberger. Otro paquete comercial es RockWorks, comercializado por Rockware.

#### g) Modelado estructural

Para el análisis y modelado de datos estructurales existen dos paquetes; StereoNet y GeOrient; este último está más actualizado.

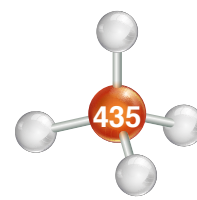
#### h) Sistemas de información geográfica

Estos sistemas son útiles para integrar una gran diversidad de información superficial referenciada, incluyendo fotografía aérea e imágenes de satélite. Con ellos se simplifica grandemente el trabajo cartográfico y el análisis geoestadístico. El paquete comercial más utilizado es la familia de productos ESRI (ArcGIS).

### 21.13.2 Geofísicas

Como complemento y apoyo a la exploración geológica, se dispone de varias técnicas que miden alguna propiedad física del subsuelo, mediante sondeos realizados en la superficie del terreno o levantamientos aéreos; con los datos de campo se elaboran modelos uni, bi o tridimensionales de la distribución de dicha propiedad en el subsuelo. Posteriormente, se hace una interpretación geológica del modelo geofísico. Las propiedades de subsuelo sujetas a estos estudios son las siguientes:

- a) Propiedades eléctricas (métodos resistivos).
- b) Densidad de los cuerpos (gravimetría).
- c) Propiedades magnéticas (magnetometría).
- d) Propiedades sísmicas.





### 21.13.3 Geoquímicas

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22

Mediante la exploración geoquímica se pueden identificar estructuras activas por las que se emiten diferentes gases a la atmósfera y que pudieran indicar la presencia de actividad hidrotermal a profundidad. Otra técnica es el uso de la composición química e isotópica de las manifestaciones termales para conocer el origen de los fluidos, inferir temperaturas a profundidad, determinar el potencial corrosivo o incrustante de los fluidos y establecer la relación de los fluidos hidrotermales con la hidrología e hidrogeología de la zona. Las herramientas disponibles son las siguientes:

#### a) Detección de elementos traza y gases del suelo

El fundamento de estas técnicas de prospección es el supuesto de que, a través de fallas y fracturas, se descargan algunos elementos traza como el Hg y estos se fijan en el suelo; o pueden ser gases, como el  $^{222}\text{Rn}$ , cuya vida media es de 3.824 días y emite partículas alfa al decaer. Otro tipo de gases que pueden monitorearse son el  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ , B,  $\text{CH}_4$ . Estas técnicas pueden ser útiles en las etapas tempranas de la exploración geotérmica, cuando se busca ubicar zonas específicas en una región relativamente grande (varias decenas o cientos de  $\text{km}^2$ ). Existe equipo comercial para realizar estas mediciones.

#### b) Muestreo y análisis químico de agua y gases

Se toman muestras de agua y vapor y del material de alteración, para su análisis en laboratorio y posterior interpretación. Las muestras se usarán para análisis químicos de elementos mayores y menores, así como de isótopos ambientales. A las muestras de material de alteración se le practican análisis químicos y mineralógicos (Difracción de rayos X).

#### c) Muestreo y análisis isotópico de agua y gases

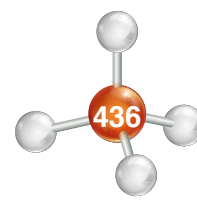
El muestreo de agua y gases para análisis isotópico es muy similar al muestreo para análisis químicos.

Los isótopos son átomos de un mismo elemento químico, por lo que poseen igual número de protones (número atómico). Sin embargo, el número de neutrones es distinto, por lo que la masa atómica, igual a la suma de protones y neutrones, es diferente. Algunos de los isótopos de los elementos ligeros, es decir, con números atómicos pequeños, son inestables, y decaen, transformándose en otra configuración distinta. Al hacerlo, emiten radiación, que puede ser de tres tipos: partículas alfa (dos protones y dos neutrones), beta (un electrón o un positrón) o gama (un fotón).

Estos isótopos comparten ciertas propiedades, entre otras, que son elementos ligeros, abundan en la naturaleza y ostentan gran movilidad, pues participan en muchas reacciones y cambios de fase. Esto los hace muy útiles como trazadores de los procesos naturales.

Las propiedades fisicoquímicas de los isótopos de un mismo elemento son muy semejantes, ya que la configuración electrónica de las moléculas es la misma. Sin embargo, debido a la diferencia de masa atómica, la energía vibracional de las moléculas es un poco diferente para cada isótopo, siendo ligeramente mayor para el isótopo de menor masa. Como consecuencia, las propiedades fisicoquímicas varían ligeramente entre los isótopos de un mismo elemento. Durante el proceso de evaporación, los isótopos ligeros se concentran en la fase vapor con una tasa proporcionalmente mayor que la de los isótopos pesados, dando como resultado que, en la fase vapor, haya una proporción mayor de isótopos ligeros que en la fase líquida remanente. Este fenómeno es conocido como *fraccionamiento isotópico*.

Los cambios de fase, las reacciones de precipitación y disolución (que son reacciones de intercambio molecular) y las de oxidación y reducción, son los principales procesos naturales en





los que ocurre el fraccionamiento isotópico. Esto es, la proporción original de isótopos ligeros y pesados de un mismo elemento varía en los productos resultantes del proceso, ya sea que se incremente la proporción de isótopo pesado o la del ligero.

Debido al fraccionamiento isotópico, la abundancia natural de los isótopos estables ligeros varía en los materiales de la corteza terrestre, en el agua y en el aire.

La composición isotópica de una muestra se expresa en unidades *delta por mil* ( $\delta\%$ ), que representa el mayor o menor contenido del isótopo pesado con respecto a un patrón universal de referencia.

La composición isotópica del agua nos da información acerca de su origen y de su historia en el ciclo hidrológico. Las aguas geotérmicas asociadas a cuerpos magmáticos poseen una composición isotópica que las caracteriza.

#### d) Interpretación de los resultados y diagramas geoquímicos

Generalmente los yacimientos geotérmicos no son sistemas cerrados, por lo que existen descargas superficiales en forma de manantiales, fumarolas, pozas ácidas o suelos vaporizantes.

Los manantiales son catalogados como templados, calientes e hirvientes.

Los *manantiales templados* son aquellos cuya temperatura no excede los 45° C. La concentración de sales es baja, de tipo bicarbonatado. Están asociados a sistemas termales de temperaturas bajas o moderadas y no están relacionados con intrusiones magmáticas.

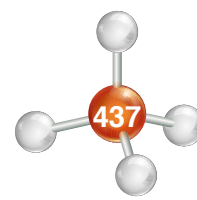
Los *manantiales calientes* presentan temperaturas superiores a 45° C e inferiores al punto de ebullición correspondiente al lugar. La salinidad y la composición química de estos manantiales es muy variable y depende del tipo de sistema hidrotermal al que están asociados.

Los *manantiales hirvientes*, en la mayoría de los casos, están asociados a sistemas hidrotermales magmáticos de alta temperatura. Son, por regla general, del tipo clorurado sódico, con concentraciones altas de potasio, bajas concentraciones de calcio y muy bajas de magnesio. El pH es neutro o ligeramente alcalino. Estos manantiales son descargas líquidas de los reservorios y, por ello, se localizan en las partes bajas de los campos geotérmicos.

Los géiseres son un caso peculiar de manantiales hirvientes que involucran cambios de fase intermitentes. Se caracterizan por lanzar un chorro de agua y vapor a intervalos regulares. La altura del chorro varía de unos decímetros a decenas de metros y el intervalo puede ser de unos minutos a varias horas.

Las fumarolas son descargas de vapor saturado o ligeramente sobrecalentado. Se localizan en las partes altas de los campos geotérmicos. Estas descargas tienen una presión algo mayor que la atmosférica, de tal forma que emiten un “chiflido” y lanzan un chorro de vapor apreciable, aunque sea pequeño. Las fumarolas volcánicas, en comparación con las geotérmicas, presentan temperaturas más altas y presencia de SO<sub>2</sub>, HCl y HF.

En ocasiones, las fumarolas descargan a través de suelo saturado de agua, dando lugar a la formación de pozas ácidas con lodo. Esto se debe a que parte del H<sub>2</sub>S se disuelve en el agua y, mediante la acción catalizadora de bacterias, se oxida como H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, que es un ácido fuerte. Al reaccionar este fluido ácido con la roca, la altera y se obtiene caolinita y otras arcillas, que dan la apariencia lodosa a estas charcas. Como resultado de la disociación del ácido sulfúrico, el pH es muy bajo, lo que significa una alta concentración de H<sup>+</sup> y, por otra parte, el anión predominante es el SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>.





Cuando una fumarola es rica en  $H_2S$  y, como consecuencia, se deposita azufre elemental a su alrededor, se conoce como *solfataras*. Si abunda en  $CO_2$ , se llama *mofeta*.

Los suelos vaporizantes, que no deben confundirse con las fumarolas, son descargas difusas de vapor, sin presión y en áreas amplias. Por lo general, se trata de descargas secundarias de un reservorio geotérmico. El calor de éste se transporta, de manera conductiva, hacia el suelo saturado de humedad, produciendo la vaporización.

La alteración hidrotermal de tipo argilítico, que es característica en las zonas de descarga de vapor geotérmico, puede ser representada por la siguiente reacción:

Roca (base) + fluido geotérmico (ácido)  $\leftrightarrow$  sales disueltas + sílice disuelta + minerales argilíticos de alteración (caolinita).

En la interpretación de los datos químicos es muy importante contar con un modelo conceptual de la hidrogeología de la zona, aunque sea preliminar. De otra manera, los datos de cada manifestación individual quedan como información puntual y no relacionada entre sí.

### e) Geotermometría química e isotópica

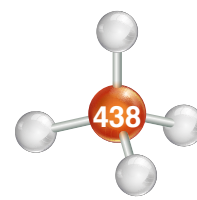
La composición química del agua de los manantiales termales puede ser útil para estimar la temperatura del yacimiento del que se descarga. La temperatura se calcula con fórmulas llamadas *geotermómetros*, en parte empíricas, en parte basadas en la teoría de equilibrio químico. (Benjamin et al., 1983; Nicholson, 1993; Arnórsson et al., 2006). El principio general en que se basan los geotermómetros es el supuesto de que, en las condiciones de temperatura del yacimiento, los solutos que intervienen en la fórmula están en equilibrio químico. Una vez que el agua de yacimiento escapa y asciende a la superficie, va enfriándose paulatinamente, ya sea por dilución, por conducción o por ebullición. Conforme disminuye la temperatura, la cinética del reequilibrio se hace cada vez más lenta y, por lo tanto, el agua del manantial mantiene la señal química de la temperatura original del yacimiento o con una pequeña modificación. Para que un geotermómetro funcione, se requiere que el tiempo de reequilibrio sea, por lo menos, un orden de magnitud mayor que el tiempo de ascenso del agua.

Es muy importante saber en qué condiciones se puede hacer uso de estos geotermómetros. Lo primero es que se apliquen a manantiales del tipo clorurado sódico y de alta temperatura (mayor a  $80^\circ C$ , aunque esto no debe tomarse como una regla inflexible), de tal manera que el manantial realmente represente una descarga de la fase líquida del yacimiento y que no se haya diluido mucho en su ascenso a la superficie. Con menos confiabilidad, pueden aplicarse a manantiales clorurado-sulfatados, teniendo en cuenta las condiciones hidrogeológicas del manantial.

Los geotermómetros más comúnmente usados en la etapa de exploración son los siguientes:

### \*Geotermómetros basados en sílice disuelto

En todas las fórmulas, "c" representa la concentración de sílice disuelto en mg/l. Las fórmulas varían en función de la fase sólida del sílice que controla la solubilidad. White (1957), Ellis y Wilson (1960), Ellis y Mahon (1964), D'Amore y Arnórsson (2000) y Verma (2002). La fórmula con pérdida máxima de vapor se debe aplicar en los casos de manantiales de altas temperaturas. Todas estas fórmulas han probado ser confiables y útiles. Estos geotermómetros son sensibles a los efectos de dilución, ya que el cálculo se basa en la concentración de una sola especie.







$$\text{Calcedonia (Fournier): } t(C) = \frac{1032}{4.69 - \log c} - 273$$

$$\text{Cuarzo (Fournier): } t(C) = \frac{1309}{5.19 - \log c} - 273$$

$$\text{Cuarzo con pérdida máxima de vapor (Fournier): } t(C) = \frac{1522}{5.75 - \log c} - 273$$

$$\text{Calcedonia-Cuarzo (Giggenbach): } t(C) = \frac{1000}{4.55 - \log c} - 273$$

### \*Geotermómetros de cationes

Estos geotermómetros están basados en la concentración de los cationes principales ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$  y  $\text{Mg}^{2+}$ ). Se emplea la razón de dos de estos cationes, por lo que son menos sensibles a los efectos de dilución. En todos los casos la concentración está dada en mg/l. (Pope et al. (1987), Verma et al., en prensa). El geotermómetro que incluye al calcio es un poco más complicado, a causa del parámetro  $\beta$  que adquiere dos valores distintos. Esta fórmula es útil en los casos en los que el calcio es relativamente alto: más de un 25% de la concentración de potasio.

$$\text{Potasio-Magnesio (Giggenbach): } t(C) = \frac{4410}{13.95 - \log \frac{K^2}{Mg}} - 273$$

$$\text{Potasio-Sodio (Giggenbach): } t(C) = \frac{1390}{1.75 + \log \frac{Na}{K}} - 273$$

$$\text{Sodio-Potasio (Fournier): } t(C) = \frac{1217}{\log \frac{Na}{K} + 1.483} - 273$$

$$\text{Sodio-Potasio-Calcio: } t(C) = \frac{1647}{\log \frac{Na}{K} + \beta [\log \frac{\sqrt{Ca}}{Na} + 2.06] + 2.47} - 273$$

$$\beta = \frac{4}{3} \text{ si } [\log \frac{\sqrt{Ca}}{Na} + 2.06] \geq 0 \text{ y } t(C) \leq 100$$

$$\beta = \frac{1}{3} \text{ si } [\log \frac{\sqrt{Ca}}{Na} + 2.06] < 0 \text{ o si } t(C) > 100$$

Giggenbach (1986) propuso un diagrama triangular que combina los geotermómetros de Na/K y de K/Mg, que permite clasificar las aguas y extrapolar la probable temperatura del yacimiento, de una manera sencilla y directa. En este diagrama los dos sistemas están representados por dos conjuntos de líneas: uno para las relaciones de Na/K y otro para las relaciones de K/Mg, donde cada valor representa líneas isothermas. La intersección de las isothermas de Na/K y K/Mg, referidas a la misma temperatura, corresponden a la composición del agua en equilibrio con las fases minerales controlando ambos geotermómetros y delineando la llamada *curva de equilibrio total*.

### \*Geotermómetros de gases

La composición química de los gases es útil para estimar la temperatura del probable yacimiento. El equilibrio químico de los gases no solo depende de la temperatura, sino también de su distribución entre las fases líquida y gaseosa, por lo que es necesario conocer la saturación de vapor en el yacimiento, Jacobo (2003). Esto hace de la geotermometría de gases una técnica más compleja. Existen varios diagramas mediante los cuales se estima la temperatura y la saturación del yacimiento.

Existen algunos geotermómetros de gases que, mediante ciertas consideraciones y ajustes empíricos, suprimen la necesidad de conocer la saturación de vapor. Algunas fórmulas de estos geotermómetros son las siguientes:

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

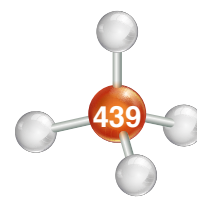
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





**D'Amore y Panichi:**

$$t(C) = \frac{24775}{\alpha + \beta + 36.05} - 273 \text{ donde:}$$

$$\alpha = 2 \log \frac{CH_4}{CO_2} - 6 \log \frac{H_2}{CO_2} - 3 \log \frac{H_2S}{CO_2} \text{ y } \beta = 7 \log P_{CO_2}$$

Donde  $\log P_{CO_2} = -1$  si  $CO_2 < 75\%$ ;  $0$  si  $CO_2 > 75\%$ ;  $1$  si  $CO_2 > 75\%$  y  $CH_4 > 2H_2$  y  $H_2S > 2H_2$ .

(Este es un ajuste empírico, basado en datos de pozos del campo de Larderello, Italia).

**\*Geotermómetros Giggenbach**

Utiliza las concentraciones de  $^2H$  y Ar, bajo el supuesto de que la fugacidad del  $^2H$  depende fuertemente de la temperatura y de que la concentración de Ar en los yacimientos geotérmicos corresponde a la de agua saturada con aire, ya que el Ar geotérmico es de origen atmosférico. La fórmula es la siguiente:

$$t(C) = 70 \left( 2.5 + \log \left( \frac{H_2}{Ar} \right) \right)$$

La concentración de los gases está dada en porcentaje molar. Este geotermómetro es particularmente útil en la etapa exploratoria.

**\*Geotermómetros isotópicos**

El factor de fraccionamiento isotópico depende de la temperatura. Si dos sustancias o dos fases de una misma sustancia están en equilibrio isotópico, es posible determinar el valor del fraccionamiento y, por lo tanto, la temperatura del último equilibrio.

Existen varios geotermómetros, pero solo unos pocos pueden usarse en la práctica exploratoria, ya sea por el costo del análisis o porque la información que arrojan es difícil de interpretar, como los siguientes:

- Fraccionamiento del oxígeno 18 entre los sulfatos disueltos en agua y el agua misma.
- Fraccionamiento del deuterio entre el hidrógeno gas y el vapor de agua.

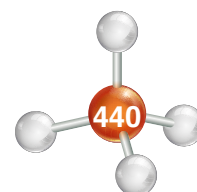
El geotermómetro del oxígeno 18 en sulfatos y agua es muy útil en la etapa de exploración, cuando existen manantiales clorurados sódicos de alta temperatura, que son descarga directa de los yacimientos. El reequilibrio de este geotermómetro a menores temperaturas es muy lento, por lo que el manantial conserva la temperatura de equilibrio en el yacimiento. Primero se establece el valor del fraccionamiento isotópico de las muestras del manantial, que es igual a la diferencia de los valores delta de los sulfatos y de agua, conforme a la ecuación siguiente:

$$10^3 \ln \alpha = \delta^{18}O_{\text{sulfatos}} \text{‰} - \delta^{18}O_{\text{agua}} \text{‰}$$

Una vez calculado el valor de  $10^3 \ln \alpha$  se puede conocer la temperatura correspondiente, recurriendo a las tablas correspondientes.

Por último, en el caso de manantiales clorurados de alta temperatura con desprendimiento de vapor y gases, se puede utilizar el geotermómetro del deuterio en el vapor de agua y en el gas hidrógeno, conforme a la siguiente relación:

$$10^3 \ln \alpha = \delta D_{H_2O_{\text{vapor}}} \text{‰} - \delta D_{H_2_{\text{gas}}} \text{‰}$$





#### f) Técnicas Termométricas

Estas técnicas miden directamente las anomalías térmicas, objetivo final de una exploración geotérmica. Pueden ser de tres tipos: medición de la distribución de temperatura superficial y sub-superficial; medición de gradiente y flujos térmicos en pozos y determinación de la descarga superficial natural de calor.

Existe un gran número de mediciones de temperatura y flujo de calor en pozos de todo el mundo. En zonas al interior de las placas tectónicas, es decir, geológicamente estables, el gradiente térmico es del orden de  $0.01$  a  $0.03^\circ \text{C/m}$  de profundidad. Según Polak, el flujo de calor promedio de la corteza oceánica es de  $101 \text{ MW/m}^2$ , el de los continentes de  $65 \text{ MW/m}^2$  y el promedio global de  $87 \text{ MW/m}^2$ . Con estos datos se infiere que el flujo de calor total de la superficie del globo terráqueo es de  $44.2 \text{ TW}$ . Más recientemente Davies & Davies han reevaluado estas estimaciones con métodos estadísticos.

Los gradientes anómalos asociados a acuíferos hidrotermales pueden llegar a ser 10 o más veces mayores, aunque un valor mayor de 3 es ya significativo. A continuación, se describen estas técnicas:

#### \*Medición de gradiente y flujo térmico en pozos

Esta técnica consiste en perforar pozos de 300 a 500 m de profundidad. Estos son valores típicos y pueden variar, dependiendo de las condiciones hidrogeológicas de la zona de interés. Como se requiere hacer perforaciones, el costo de estos estudios es significativamente mayor que el de las otras técnicas geofísicas. Precisamente en este punto reside el diseño de una prospección que dé resultados y sea viable económicamente. Las dos variables del problema son: el número de pozos y la profundidad. Se puede optar por realizar más perforaciones poco profundas y cubrir, así, una gran parte del área de estudio, con el riesgo de obtener resultados pobres, que no ayuden realmente en la ubicación y diseño de los pozos exploratorios profundos. Como alternativa, podemos perforar pocos pozos más profundos, cubriendo menos área, con el riesgo de pasar por alto las anomalías buscadas.

Los criterios de diseño de los pozos de gradiente de temperatura son los siguientes: el diámetro final de pozo debe ser lo más pequeño posible, del orden de 5 cm, cuidando que la sonda de medición pueda pasar libremente. El pozo debe estar aislado hidráulicamente de la formación en toda su longitud (para ello hay que introducir un tubo de unos 5 cm de diámetro, ciego y cerrado en la parte inferior); el espacio anular entre el tubo y la formación debe rellenarse con lodo pesado o con cemento aguado. Estas dos condiciones tienen por objeto evitar la convección en el interior del pozo y en el espacio anular, que afectaría a una correcta medición del gradiente. La presencia de un acuífero potente puede alterar significativamente el patrón de flujo vertical de calor, ya que estos transportan lateralmente grandes cantidades de calor, en la dirección del flujo subterráneo. En estos casos, para obtener resultados confiables, es preciso que los pozos se perforen por debajo del acuífero. El tubo se llena de agua hasta el brocal.

Se debe dejar reposar al pozo por un lapso de tiempo para que la columna de agua en su interior alcance el equilibrio térmico con la formación. Esto puede durar horas o días. En la práctica, lo que hay que hacer es correr registros de temperatura de manera periódica, hasta observar que no existan variaciones. Otra posibilidad es extrapolar los resultados de un registro a condiciones de equilibrio, mediante algoritmos más o menos complicados. El más usado es el conocido como *Método de Horner*.

Los perfiles de temperatura muestran típicamente intervalos donde el gradiente es positivo, zonas donde es pequeño o nulo y, ocasionalmente, zonas donde se vuelve negativo. Las zonas de gradiente pequeño o nulo corresponden a estratos saturados de agua, donde la convección vertical

Cap. 1

Cap. 2

Cap. 3

Cap. 4

Cap. 5

Cap. 6

Cap. 7

Cap. 8

Cap. 9

Cap. 10

Cap. 11

Cap. 12

Cap. 13

Cap. 14

Cap. 15

Cap. 16

Cap. 17

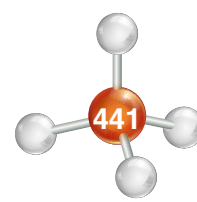
Cap. 18

Cap. 19

Cap. 20

Cap. 21

Cap. 22





del fluido en tiempos geológicos hace que la temperatura sea uniforme. Las inversiones pueden deberse a la presencia de acuíferos potentes o al hecho de que se ha pasado por un pico de temperatura debido a un flujo de descarga lateral de un acuífero termal y, después, se regresa al gradiente normal de la formación.

Si, además de la medición del gradiente térmico, se desea determinar el flujo de calor, es necesario conocer la conductividad térmica de la formación en el intervalo de interés. Esto se puede hacer de dos maneras: primero, recurriendo a los datos disponibles en la literatura y usar el que más convenga al caso; segundo, obtener un núcleo de la formación durante la perforación y medir su conductividad en el laboratorio, en condiciones similares a las reales. Obviamente el segundo método es mejor, pero mucho más caro. Por ello, es recomendable que en una prospección normal, cuya finalidad sea el descubrimiento de yacimientos geotérmicos, se utilicen valores convencionales obtenidos de datos publicados. Lo segundo se justifica sólo en caso de estudios de carácter científico.

#### **\*Determinación de la descarga natural de calor**

Si se cuenta con información de temperaturas superficiales, con medición de temperatura y aforo de fumarolas y manantiales e información radiométrica, es posible calcular la descarga natural de calor de una zona, en sus tres componentes: convectiva, conductiva y de radiación. Este valor da una idea del tamaño del sistema hidrotermal y puede ser útil para calibrar el modelo numérico, que en un momento dado se haga, del yacimiento.

### **21.14 Nuevas tecnologías en exploración geotérmica**

En la etapa de exploración geológica, se cuenta con sistemas de información geográfica herramienta muy útil para la elaboración de la cartografía y la clasificación de información referenciada de procedencia diversa: imágenes de satélite, modelos digitales de altura, levantamientos geofísicos, etc. Una vez integrada, la información puede ser procesada con una gran variedad de criterios y procedimientos con objeto de poseer mayor conocimiento de las condiciones superficiales y del subsuelo.

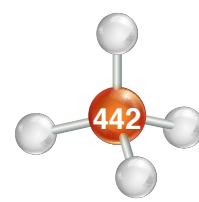
Con ayuda de la tecnología, es posible realizar visualizaciones en 3D en superposición de capas, para realizar un análisis a detalle de cada punto de interés.

Los estudios isotópicos, tanto estables como radiactivos (dataciones), y de tierras raras son útiles para un estudio detallado de la evolución magmática de una zona.

En levantamientos magnetotélúricos, los equipos de medición y las técnicas de procesado han mejorado notablemente en los últimos años, de tal manera que un MT de amplio espectro es actualmente la tecnología preferida para estudios de resistividad del subsuelo.

En algunos campos geotérmicos se ha comenzado a usar la sísmica de reflexión, particularmente en Italia. Esta tecnología, una vez que llegue a ser adaptada a ambientes de rocas volcánicas, puede convertirse en la técnica geofísica por excelencia para conocer la estructura del subsuelo a detalle. Existen, además, diferentes software y métodos de análisis de resultados que permiten correlacionar otros métodos con la sísmica de reflexión.

El uso de sensores remotos para estudios de radiometría y la formación de imágenes térmicas de la superficie del terreno es una tecnología todavía en desarrollo, pero puede ser una herramienta útil en las etapas tempranas de prospección, en las que se desea cubrir una zona extensa a un costo razonable.





Los levantamientos aéreos TEM son una técnica probada para ciertas aplicaciones. Sin embargo, para la industria geotérmica esto es insuficiente, pues se requiere de mayor penetración en el subsuelo y mayor calidad de los datos, así como lidiar con el problema de la topografía cambiante.

La tomografía sísmica y eléctrica son también tecnologías en desarrollo que pueden ser muy útiles en el conocimiento detallado de la estructura del subsuelo. Actualmente comienzan a surgir métodos en los cuales ya es posible tomar la medición en las tres direcciones, generando datos y resultados en 3D. Sin embargo, estas formas de adquisición aún no han sido corroboradas para el campo de estudio geotérmico.

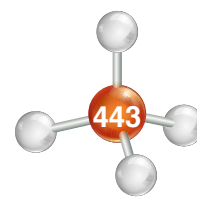
La geomecánica es la ciencia que estudia el comportamiento mecánico de masas de roca sujetas a esfuerzos y deformaciones. Esta disciplina puede llegar a ser una herramienta indispensable para entender cómo y dónde se crea fallamiento y fracturamiento en las rocas, que generen permeabilidad.

El desarrollo de software para elaborar modelos tridimensionales y multidisciplinarios es indispensable para una mejor y más rápida integración e interpretación de los datos.

### 21.15 Programa general de exploración geotérmica

No obstante que es difícil diseñar un programa de exploración general para cualquier proyecto, debido a que cada caso tiene sus particularidades, es válido presentar el siguiente a manera de guía y sugerencia:

1. Elaboración de la cartografía geológica básica: modelo topográfico, plano litológico, vulcanológico y estructural. Como herramientas se pueden utilizar imágenes de satélite, modelos digitales de elevación y prospección de campo.
2. Realizar mediciones de emanación de gases del suelo, de temperatura subsuperficial o estudios radiométricos con percepción remota, si el área de estudio es extensa y no se tienen zonas específicas identificadas.
3. Identificación y muestreo de manifestaciones termales y zonas de alteración hidrotermal. Análisis químicos e isotópicos de las muestras. Procesado de los datos.
4. Estimación de la descarga natural de calor.
5. Estudio de resistividad del subsuelo. Si no se han podido definir zonas específicas, se inicia con un estudio de carácter regional, con sondeos cada 2 km. Una alternativa, en esta etapa regional, es utilizar la técnica del potencial espontáneo, que es barata y rápida. Una vez identificadas las zonas de interés, se debe llevar a cabo una campaña con mayor densidad de sondeos. La técnica más recomendada es una combinación de sondeos AMT y MT. Si esto no es posible, se recomiendan sondeos TEM.
6. Estudio de gravimetría. Antes de llevar a cabo mediciones de campo, investigar si existe información disponible. Si el área que se desea investigar es grande, se recomienda realizar un estudio aerogravimétrico; de lo contrario se llevan a cabo mediciones sobre el terreno. En este último caso, es muy importante realizar un levantamiento topográfico de precisión simultáneo.
7. Los estudios magnetométricos son un refuerzo a los gravimétricos. No es tan importante realizar estos estudios, sobre todo si se cuenta con un presupuesto reducido. En zonas volcánicas y con topografía abrupta, la magnetometría arroja información de las unidades litológicas más someras y está muy influenciada por los cambios topográficos.







8. Perforación de pozos de gradiente de 300 a 500 m de profundidad. Medición del gradiente y flujo térmico.

9. Integración de un modelo conceptual del yacimiento y evaluación preliminar de su potencial, mediante modelos sencillos de estimación del calor almacenado en la roca y el fluido o de descompresión progresiva.

Las actividades 1 a 6 se refieren a la exploración superficial, la actividad 7 corresponde a la perforación de tres pozos de gradiente y la actividad 8, a la perforación de dos pozos exploratorios a mayor profundidad en diámetros convencionales (terminación en agujero de 8.5 pulgadas).

En todos los casos, el investigador debe hacer las adecuaciones pertinentes para cada área de estudio.

Las inversiones en actividades de exploración superficial son menores. Las inversiones fuertes se dan a partir de la etapa de perforación, primero de pozos de gradiente a una profundidad del orden de 500 m y después con los pozos exploratorios profundos de 2000 a 2500 m.

### 21.16 Conclusiones

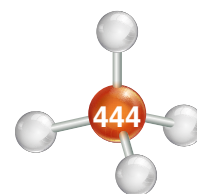
La energía geotérmica ofrece un flujo constante de producción. Depende de las características intrínsecas del subsuelo (gradiente geotérmico) y de la permeabilidad de las rocas; es muy importante porque permite un aprovechamiento de la energía de forma limpia, puesto que los residuos que produce son mínimos y ocasionan menor impacto ambiental que los originados por combustibles fósiles.

Una de las técnicas de exploración es a través de métodos geoquímicos, identificando estructuras activas por las que son emitidos diferentes gases a la atmósfera que pudieran indicar la presencia de actividad hidrotermal a profundidad. Con el estudio de la composición química e isotópica de las manifestaciones termales, se puede conocer el origen de los fluidos, inferir temperaturas a profundidad, determinar el potencial corrosivo o incrustante de los fluidos y establecer la relación de los fluidos hidrotermales con la hidrogeología de la zona.

El análisis geoquímico consiste en la toma de muestras de agua y vapor y del material de alteración, para ser analizados en laboratorio e interpretarlos. A las muestras se les realizan análisis químicos de elementos mayores y menores, así como de isótopos ambientales. A las muestras de material de alteración se le realizan análisis químicos y mineralógicos.

La composición isotópica del agua nos da información acerca de su origen y de su historia a través del ciclo hidrológico. El agua de origen geotérmico asociada a cuerpos magmáticos posee una composición isotópica que las caracteriza.

En la interpretación de los datos químicos es muy importante tener un modelo conceptual del funcionamiento hidrogeológico de la zona para que los datos obtenidos de manifestaciones individuales no se interpreten como información puntual.





# Capítulo 22

## Diagramas de fase para sistemas silicatados

Carlos Heinrich Schulze Schreiber

### 22.1 Introducción

En nuestro planeta, las rocas de origen magmático son producto de la fusión parcial del manto y de la corteza terrestre, muestran diversos procesos e historias de emplazamiento y solidificación. A principios del Siglo XX se inició la investigación de la simulación de los procesos de cristalización de diferentes tipos de magmas y los principios termodinámicos que definen el equilibrio de los minerales formadores de roca. Se usaron hornos de altas temperaturas a presión de 1 bar (1.0132 atmósferas) en estado seco para elaborar los sistemas sintéticos que permiten documentar como se forman los diferentes minerales que constituyen rocas de origen magmático.

Para facilitar la enseñanza-aprendizaje de los diferentes procesos magmáticos se utilizan sistemas y diagramas que muestran las diversas fases en equilibrio. Los sistemas naturales son mucho más complejos que los diagramas sintéticos que en este capítulo se discutirán, sin embargo, son una buena aproximación para el entendimiento de los procesos de cristalización y fusión que ocurren dentro de un sistema magmático natural.

Los diagramas son descritos utilizando ecuaciones en equilibrio entre el líquido, sólido y su composición, que se obtienen directamente de dichos diagramas. Además, se ilustran las texturas a diferentes temperaturas y su composición mineralógica, junto con las secuencias de cristalización y cristalización fraccionada. Es importante resaltar que las cantidades obtenidas de las relaciones líquido, sólido y su composición, pueden variar hasta 1.0% de acuerdo a la medición gráfica que se obtiene a partir del diagrama. El punto de referencia en las ecuaciones siempre va a ser el de la temperatura del líquido.

### 22.2 Generalidades

Un diagrama de fases es la representación gráfica de un sistema. Para describirlo es necesario definir los siguientes conceptos:

**Sistema:** Es una porción del universo que queremos estudiar. El universo incluye todo lo que nos rodea, desde más allá de nuestra galaxia, hasta la partícula subatómica más pequeña. Así, para estudiar la historia petrogenética de un plutón granítico se deben acopiar muchas muestras, donde cada una de ellas representa un sistema. Las muestras elegidas durante la recolección deben ser representativas y deben estar georreferenciadas.

**Alrededores:** Todo aquello que en el momento no va a ser estudiado y queda fuera del sistema. En el caso de un plutón granítico, los alrededores corresponden a todo lo que envolvió a la muestra

#### Sumario

##### 22.1 Introducción

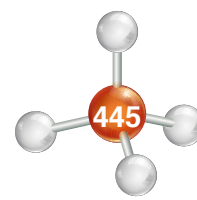
##### 22.2 Generalidades

##### 22.3 Sistemas de un componente

##### 22.4 Sistemas de dos componentes

##### 22.5 Sistemas de tres componentes

##### 22.6 Conclusiones





de granito que se separa del batolito. Sin embargo, las características texturales y composición mineralógica de la roca aislada por el geólogo durante la recolección pertenecen a un determinado momento de la historia de cristalización del plutón. Esta historia, precisamente, es la que se trata de deducir aplicando el conocimiento obtenido de los diagramas de fase.

**Sistema abierto:** Evento que ocurre cuando hay transferencia de energía y materia del sistema hacia sus alrededores o viceversa. Entre el sistema (muestra) y las rocas que yacen alrededor de él (alrededores), durante el emplazamiento del plutón, existe un intercambio de energía en forma de calor, presión y fluidos silicatados.

**Sistema cerrado:** En este sistema, sólo puede haber transferencia de energía hacia los alrededores en forma de calor. Esto sucede, principalmente, durante la etapa de enfriamiento del sistema una vez consolidado.

**Sistema aislado:** Evento que ocurre cuando no hay intercambio de energía ni de materia. Estado ideal que debe presentar un sistema (muestra), ya que se asemeja más a las condiciones experimentales. Durante la recolección se debe asegurar que la roca no sufrió alteraciones como metasomatismo, intemperismo y alteraciones ocasionadas por la acción mecánica. Entre más fresca sea la roca recolectada, mejores serán los resultados y más precisa la interpretación petrogenética.

**Estado:** Descripción completa de las propiedades físicas y químicas de un sistema (líquido, sólido o gas). El estado es definido por la temperatura (T), presión (P), volumen (V), masa (m), densidad ( $\rho$ ), composición (X); como por ejemplo el contenido de agua en un mineral o roca. Todas estas variables (intensivas y extensivas) son necesarias para describir completamente al sistema. Algunas tienen que fijarse, porque son interdependientes: si se conoce el volumen y la masa del sistema, se sabe su densidad.

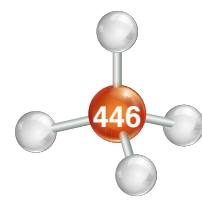
**Fase (F):** Material físicamente distinto y mecánicamente separable del resto de los materiales. Por ejemplo, un mineral o un material amorfo, un líquido o un gas. Un iceberg coexiste con el agua del mar, así se tienen dos fases: hielo y agua. Dos pedazos de hielo conforman una sola fase, y se definen por una sola componente:  $H_2O$ .

**Componente (C):** Es el mínimo de entidades químicas independientes que precisan a un sistema, como el  $SiO_2$ ,  $Al_2O_3$ ,  $KAlSi_3O_8$ ,  $(Mg_{0.50}, Fe_{0.50})_2(SiO_4)$ ,  $H_2O$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$ , etc. Los componentes también pueden ser definidas por minerales como la Di (diópsido) o la Ab (albita), los cuales deben de ser químicamente puros o sintéticos.

Para el propósito de la regla de las fases es necesario delimitar el número de componentes o el mínimo de especies químicas requeridas para definir el sistema o todas las fases que lo componen.

Por ejemplo, el  $SiO_2$  (cuarzo) presenta diferentes posiciones de sus componentes en su red cristalina, de acuerdo con la presión y temperatura. Cada acomodamiento o red cristalina de  $SiO_2$  de un mineral define un campo bajo condiciones estables en un diagrama de fase. Varios tipos de redes cristalinas de la misma composición definen varios campos o minerales en un sistema y son llamados *polimorfos*. En este caso, el sistema se define con una sola componente:  $SiO_2$ .

La albita pura ( $NaAlSi_3O_8$ ) es una componente simple, si todo el sistema está constituido por este mineral. Sin embargo, si se combina con la anortita  $CaAl_2Si_2O_8$  forma tres campos: líquido, líquido-sólido y sólido. El campo líquido-sólido, entre el líquido y el sólido, se conoce como *solución sólida compartida "SS"* (Apéndice D. II). Al aumentar la temperatura, el aluminio ( $Al^{3+}$ ) es sustituido por sílice ( $Si^{4+}$ ) y el sodio ( $Na^{1+}$ ) por el calcio ( $Ca^{2+}$ ). Si la temperatura baja, el intercambio es a la inversa. El  $Na^{1+}$  no puede sustituir al  $Ca^{2+}$  si el  $Si^{4+}$  no es sustituido por  $Al^{3+}$ . La





suma de los cationes siempre tiene que ser <sup>+5</sup>. La anortita y la albita puros, definen un sistema de dos componentes y la variación de sus proporciones se define por la serie continua de las plagioclasas.

La elección de las componentes depende del comportamiento del sistema. Por ejemplo: al subir la temperatura, la calcita ( $\text{CaCO}_3$ ) se descompone en  $\text{CaO}$  y  $\text{CO}_2$  y no se puede proponer al  $\text{CaCO}_3$  como un solo componente. Para definir bien el sistema del  $\text{CaCO}_3$ , se necesitan dos componentes:  $\text{CaO}$  y  $\text{CO}_2$ .

**Variables:** Son aquellos valores que son necesarios para definir el estado de un sistema. Estos valores pueden variar y cambiar las propiedades de estado por lo que se les conoce como “variables de estado”. Por su naturaleza se clasifican en dos grupos: *extensivas* e *intensivas*.

- 1) **Variables extensivas:** dependen del tamaño del sistema, por ejemplo: masa (g), volumen (l o  $\text{cm}^3$ ), número de moles (mol), etc. son propiedades intrínsecas. Es posible tener 10 g o 100 g de  $\text{SiO}_2$ : el material sigue siendo el mismo y no afectan el estado macroscópico del sistema.
- 2) **Variables intensivas:** éstas no dependen de la masa o del tamaño del sistema como son la temperatura (T), la presión (P), la densidad ( $\rho$ ), etc. Si dividimos una variable extensiva entre otra, la extensión se cancela y la relación es una variable intensiva. Por ejemplo, cuando el volumen de una fase se divide entre el número de moles (volumen molar) o es la densidad que es el producto de la división de la masa entre el volumen.

Estas dos variables deben ser definidas para determinar el estado de un sistema. La densidad del agua cambia con la temperatura: al subirla, el agua se expande y se vuelve menos densa. Con respecto a la presión, si ésta sube, el agua se contrae (propiedad intensiva conocida como *compresibilidad*). Otra variable intensiva es la composición de una fase dada: el número de moles de Fe y Mg en el olivino es una variable extensiva, el cociente Fe/Mg es intensiva y afecta a propiedades como el volumen molar y la densidad.

Es importante conocer cuando menos dos variables intensivas para definir completamente el sistema. En geología, las variables son la temperatura (T) y la presión (P); por ejemplo, al definir la temperatura  $T = 0^\circ - 5^\circ \text{C}$  y la presión  $P = 0.1 \text{ MPa}$  (una atmósfera), todas las demás variables intensivas como la densidad, volumen molar y capacidad calorífica quedan fijos.

## 22.3 Sistemas de un componente

### 22.3.1 La regla de las fases

Esta regla fue desarrollada por Willard Gibbs en 1874 y establece que los grados de libertad (GL) están dados por el número de variables que pueden cambiar su estado (del sistema). En primer lugar, se tienen variables como la temperatura (T), la presión (P) y la concentración química (X). Otras variables, como la capilaridad, las fuerzas gravitacional, magnética, eléctrica o la tensión superficial no se toman en cuenta. La regla de las fases de Gibbs se expresa como:

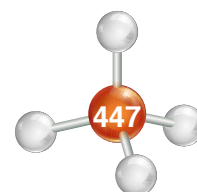
$$GL = C - F + 2 \dots\dots\dots \text{Ec. 22.1}$$

GL: número de grados de libertad o variancia. Son el mínimo de variables intensivas que se deben especificar para definir el estado de equilibrio del sistema.

F: número de fases en el sistema.

C: número de componentes.

La ecuación 22.1 establece que por cada componente que se añade al sistema, se fija una variable intensiva adicional para definir bien su estado. Para cada fase adicional se necesita especificar otra variable. Una vez definido el número de variables intensivas, todas las demás deben de estar fijas.





La regla de las fases solo se puede aplicar en sistemas en equilibrio o estacionario y no en tránsito (Apéndice D. III).

### 22.3.2 Sistema H<sub>2</sub>O

El diagrama de fases que representa al agua (Figura 22.1) es de un componente integrado por tres fases: agua cristalizada o hielo, agua líquida y vapor de agua. Las tres fases coexisten y están en equilibrio en un punto llamado *punto triple* (no necesariamente equivale a un punto invariante), en el cual convergen las líneas en las cuales

coexiste la fase sólida o hielo con el agua líquida (línea T-F), agua líquida con el vapor (línea T-E); y hielo con vapor (Línea T-S) a una temperatura de 0.008°C y 0.06 bar de presión. La línea S-T, que divide el hielo del vapor, es de baja presión. Cuando el hielo pasa a la fase gaseosa, se presenta la sublimación. La línea del punto invariante "T" (que en este caso está presentado por un punto triple) hasta el punto crítico "E", el cambio de la presión o la temperatura (F = 1), el líquido pasa a ser vapor (evaporación), o el vapor se hace líquido, (condensación). En el punto invariante de este sistema, coexisten el hielo, el vapor y el líquido. Aplicando la regla de las fases para el punto triple o invariante, (P y T fijos) se tiene:

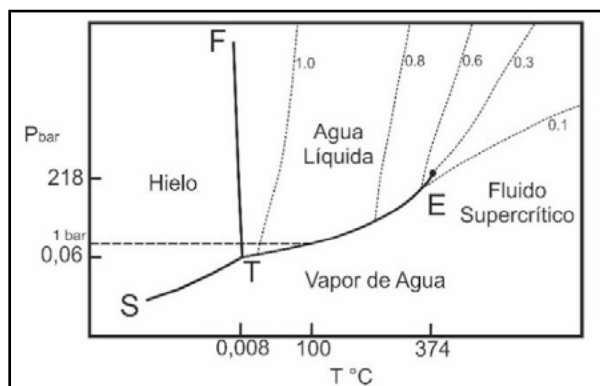


Figura 22.1. Diagrama de fase que ilustra de manera esquemática las cuatro fases del agua: Hielo, agua líquida, vapor y fluido supercrítico. Diagrama adaptado de Kennedy y Holster (1966) tomado de Ernest W. G. (1976) y Helgeson H. C. (1964).

$$F = 1 - 3 + 2 = 0 \dots\dots\dots \text{Ec. 22.2}$$

La ecuación 22.2 indica cero grados de libertad y no permite cambiar la temperatura ni la presión para que el sistema se mantenga en equilibrio y sea invariante. La línea de cada una de las fases entre sí es conocida como *línea univariante*, y la regla de las fases establece que sólo se tiene un grado de libertad:

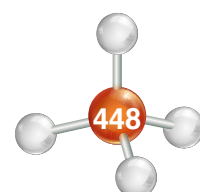
$$F = 1 - 2 + 2 = 1 \dots\dots\dots \text{Ec. 22.3}$$

Dentro cada una de las regiones delimitadas por las líneas univariantes, el sistema posee dos grados de libertad de tal manera que se puede variar tanto la temperatura como la presión y la fase sigue en equilibrio. La regla de las fases, por lo tanto, es:

$$F = 1 - 1 + 2 = 2 \dots\dots\dots \text{Ec. 22.4}$$

Ahora, se analiza el punto "E" llamado *punto crítico* definido a una  $T_E = 375.15^\circ\text{C}$  y  $P_E = 218$  bar. En este punto finaliza la línea de equilibrio univariante T-C y cada una de las fases, agua líquida y agua en ebullición, dejan de ser fases con características propias. En este punto, el líquido y el vapor muestran características idénticas y no hay distinción entre ambas fases. La P y la T arriba de este punto definen la *región supercrítica*.

El diagrama de la Figura 22.1 es importante para entender las fases del agua en sistemas hidrotermales en campos geotérmicos, yacimientos minerales, el ciclo del agua en nuestro planeta, la industria y otros en el Universo.







La línea T-F con pendiente negativa que limita el sólido (hielo) del líquido, no es muy común encontrarlas en diagramas de fase, debido a que el hielo tiene más volumen que el agua líquida. La línea que divide el hielo del vapor es de baja presión.

### 22.3.3 Sistema SiO<sub>2</sub>

El diagrama representado en la Figura 22.2 es de una componente (SiO<sub>2</sub>) definido por dos variables de estado: la presión (kbar) y la temperatura (°C). Además, muestra 6 campos de estabilidad de las 6 fases polimórficas del SiO<sub>2</sub> y un campo líquido. Se considera en el diagrama el punto "A", que se ubica en el campo de estabilidad de la coesita, a una presión de 60 Kbar y una temperatura 1430°C. Aplicando la regla de las fases:

$$F = 1 \quad GL = 1 - 1 + 2 = 2 \dots\dots\dots \text{Ec. 22.5}$$

Cuando la variancia es 2, los campos se denominan *divariantes* y usualmente definen un área P-T donde un mineral se encuentra estable, como en el caso de la coesita. En este campo se pueden cambiar, indistintamente, las dos variables intensivas: T y P. Si la presión baja de 60 kbar del punto "A" al punto "B" a 42 kbar y la temperatura es constante de 1430°C (fenómeno conocido como *descompresión*), en el punto "B", ubicado sobre la línea la coesita cambia parcialmente a cuarzo β. En el punto "B" ambos minerales coexisten en equilibrio. Así:

$$F = 2 \quad GL = 1 - 2 + 2 = 1 \dots\dots\dots \text{Ec. 22.6}$$

La línea que divide dos campos se conoce como *línea univariante*. Estas líneas o curvas sólo se fijan con una de las variables intensivas: la temperatura o la presión.

En el punto "C" convergen las tres líneas univariantes en un punto triple, los grados de libertad o variancia de acuerdo a la regla de las fases:

$$F = 3 \quad GL = 1 - 3 + 2 = 0 \dots\dots\dots \text{Ec. 22.5}$$

En el punto "C" coexisten tres fases: cuarzo β, tridimita y cristobalita y se denomina *invariante* (Ec. 22.5). En este caso se tienen que fijar tanto la T como la P y la variancia es cero.

## 22.4 Sistemas con dos componentes

Antes de describir los diagramas de dos componentes es necesario considerar el concepto de solución sólida (Apéndice D. II).

### 22.4.1 Solución sólida (SS)

Las soluciones sólidas juegan un papel muy importante en el entendimiento de los diagramas de fase y siguen las reglas de Goldschmidt y Ringwood (Apéndice D. I)

La solución sólida ocurre cuando un catión o anión sustituye a otro catión o anión en la misma posición en la red cristalina de un mineral.

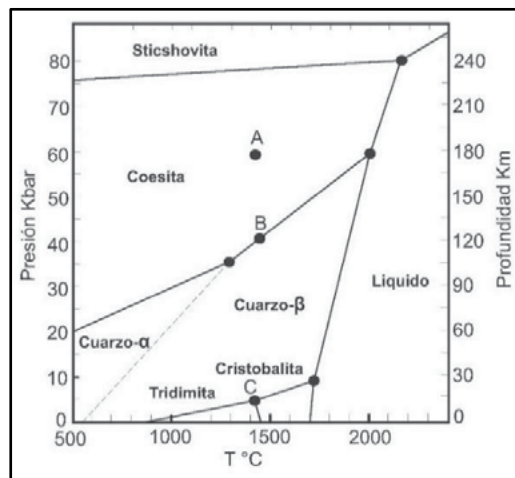


Figura 22.2. Diagrama de fase del SiO<sub>2</sub>. (Diagrama de Boyad F. R. and England J. L. 1960).



Anión:  $A^+X^-$ ;  $X^- \Leftrightarrow Y^- \dots F^- \Leftrightarrow Cl^-$

Las dos soluciones sólidas más importantes para el estudio de los diagramas de fase son la **solución sólida binaria**, que puede ser completa o parcial, y la **solución sólida compartida**. Otros casos menos importantes para el estudio de los diagramas de fase corresponden a aquellas estructuras cristalinas, en las cuales existen posiciones vacantes, como la **intersticial** y la llamada por **omisión** (Apéndice D. II).

### 22.4.2 Regla de la palanca o de lever

La regla se aplica para cuantificar en **porcentaje peso** (wt%) o **molar** de las fases involucradas, a una temperatura isobárica definida.

Considerar como ejemplo un diagrama de dos componentes con un campo de solución sólida (SS) (Figura 22.3).

Este diagrama de dos componentes: A y B, indicados en la abscisa X, muestra la variación de composición entre ambos. La ordenada indica la temperatura a presión constante. Para conocer la cantidad de cristal y de líquido presentes de una composición "X" a una temperatura "T" definida; tomando en cuenta que el punto X tiene una composición de 50 w% de la componente A y 50 wt% de la componente B. Si proyecta una línea horizontal isotérmica a una temperatura Tx a través del punto X, que une el punto sobre la línea univariante del sólidos Xs y el punto sobre la línea univariante del liquidus Xl, se tiene:

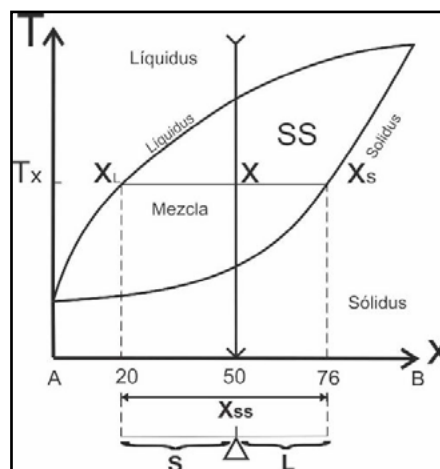


Figura 22.3. Diagrama que ilustra la regla de la palanca.

$$\text{Línea } X_L - X_S = X_{SS} = 76 - 20 = 56$$

(que es la distancia de  $X_L$  a  $X_S$ )

Ahora, para conocer la cantidad de líquido, se aplica la regla de la palanca, considerando que la distancia sobre la línea "L" o X a  $X_S$  que equivale a:  $76 - 50 = 26$  (véase parte inferior de la Figura 22.3)

La cantidad de líquido es igual a:

$$X_L X_S / X_{SS} = L / X_{SS} = 26 / 56 = 0.4642 \dots \dots \dots \text{Ec. 22.6}$$

Como es en por ciento en peso:

$$L = 0.463 \text{ por } 100 \text{ wt\% es igual a } 46.42 \text{ wt\%}$$

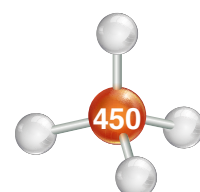
Para conocer la cantidad de sólido presente tomamos la distancia del punto  $X_L$  sobre la línea univariante del liquidus al punto X, equivalente a 30.

$$\text{La cantidad de sólido} = X_L X / X_{SS} = S / X_{SS} = 30 / 56$$

$$S = 0.5357 \dots \dots \dots 22.7$$

$$S = 0.5357 \text{ por } 100 \text{ wt\% es igual a } 53.57 \text{ wt\%}$$

La suma de los dos cocientes, tanto de la cantidad de líquido, como de la cantidad de sólido, debe ser igual a uno (suma de las ecuaciones 22.6 y 22.7) equivalente al 46.43% de líquido más el 53.57% de sólido.





Para conocer la composición del líquido y del sólido se lee sobre las abscisas X, de tal manera que la proyección vertical (línea discontinua) sobre la abscisa X del punto  $X_L$  es igual a 20 y la del sólido equivale a 76, así:

para el sólido:  $X_s = 76\text{wt\% B} + 24 \text{ wt\% A}$

y para el líquido:  $X_L = 20\text{wt\%B} + 80 \text{ wt\% A}$

La ecuación, por lo tanto, es:

Para  $T = T_x$  y  $P = \text{Constante}$

La cantidad de líquido y su composición más la cantidad de sólido y su composición en porcentaje peso (wt%) en el punto "X" es:

$$X_x = 26/56 X_L (20\text{wt\%B} + 80 \text{ wt\% B}) + 30/56 X_s (76\text{wt\% B} + 24 \text{ wt\% A})$$

Resolviendo:

$$X_x = X_L (9.3 \text{ wt\% B} + 37.13 \text{ A}) + X_s (40.71 \text{ wt\% B} + 12.86 \text{ wt\% A}) = 100 \text{ wt\%} \dots\dots\dots \text{Ec. 22.8}$$

La suma de la composición de ambas componentes, tanto del líquido como del sólido de la ecuación 22.8, debe ser igual a la composición del punto X: 50wt% A y 50wt% B.

En los diagramas de una componente las variables intensivas son la temperatura y la presión, sin variar la composición. Durante la fase experimental usualmente la presión se mantiene constante (diagrama isobárico:  $P_n$  donde  $n = 1, 2, 3 \text{ bar} \dots \text{etc.}$ ) sólo cambian la temperatura y la composición (T-X) entre los dos componentes ( $X_A-X_B$ ).

Así, la regla de las fases para diagramas de dos componentes es:

$$GL = C - F + 1 \dots\dots\dots \text{Ec. 22.9}$$

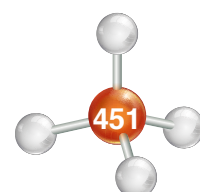
El número 1 expresa que sólo varía la temperatura y las demás variables son constantes. Los diagramas se vuelven tipo T-X, P: cte.

### 22.4.3 Diagrama binario con un eutéctico sin solución sólida

El diagrama Di-An (Figura 22.4) fue elaborado por Bowen entre 1915 y 1928, para conocer la historia de cristalización de las rocas basálticas. Las componentes del diagrama son diópsido (Di):  $\text{CaOMgO}_2\text{SiO}_2$  y anortita (An):  $\text{CaOAl}_2\text{O}_3\text{2SiO}_2$ . La diferente composición entre ambas, al cambiar la temperatura, impide la mezcla, debido a que el diópsido no contiene  $\text{Al}_2\text{O}_3$  y la anortita no contiene MgO. Ambos óxidos no pueden intercambiar sus cationes de acuerdo con las reglas de Goldschmidt (véase Anexo IIIA). El diagrama muestra cuatro campos: el de más alta temperatura, está compuesta por un líquido silicatado representado por "L" y puede variar de 100.00 a 0.00 wt% de diópsido y de 0.00 a 100 wt% de anortita.

Se toma una roca (clinopiroxena), compuesta del 100 wt% de diópsido, se fundirá a 1392 °C y si tenemos una anortosita compuesta de 100 wt% de anortita, se fundirá a 1553 °C.

El diagrama de la Figura 22.4 muestra dos líneas univariantes, del *líquidus* que convergen con la línea univariante horizontal del *solidus*, en un punto llamado *eutéctico* (e) (del griego:  $\epsilon\upsilon = \text{bien}$  y  $\tau\eta\kappa\tau\omicron\zeta = \text{fundido}$ ). Analizando el tren de cristalización del punto A al D, variando solo la temperatura a presión constante:



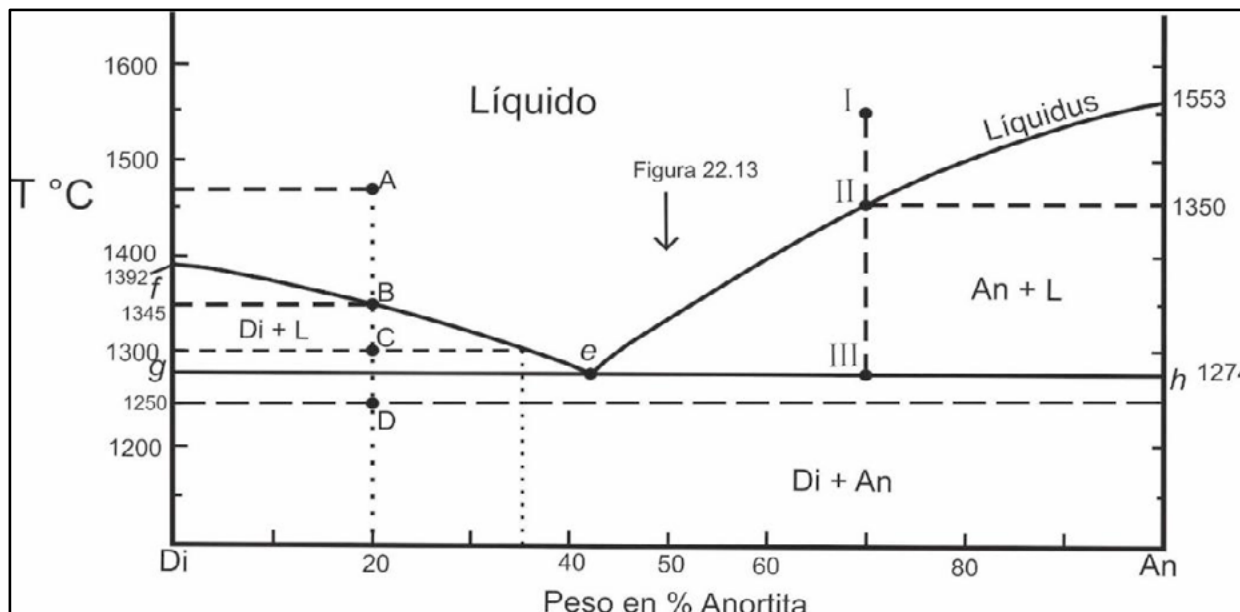


Figura 22.4. Diagrama binario diópsido (Di) – anortita (An) con un eutéctico. Diagrama de Bowen, 1915; Osborn, 1942 en Muan A. 1979 (Ed. Yoder).

En el punto A todo es líquido o todo está fundido:

$$T: 1500^{\circ}\text{C} \quad X_A = 1.00 X_L (20 \text{ wt\% An} + 80 \text{ wt\% Di}) + 0.00 X_S = 100 \text{ wt\%} \dots\dots\dots \text{Ec. 22.10}$$

En el punto B inicia la cristalización del componente diópsídico:

$$T: 1345^{\circ}\text{C} \quad X_B = 0.99 X_L (20 \text{ wt\% An} + 80 \text{ wt\% Di}) + 0.01 X_S (100.0 \text{ wt\% Di}) \dots\dots\dots \text{Ec. 22.11}$$

Llegando al punto C, sigue la cristalización del diópsido y el líquido se enriquece en la componente anortítica:

$$T: 1300^{\circ}\text{C} \quad X_C = 20/35 X_L (35 \text{ wt\% An} + 65 \text{ wt\% Di}) + 15/35 X_S (100.0 \text{ wt\% Di} + 0.00 \text{ wt\% An})$$

$$X_C = X_L (20 \text{ wt\% An} + 37 \text{ wt\% Di}) + X_S (43 \text{ wt\% Di}) = 100_{L+S} \text{ wt\%} \dots\dots\dots \text{Ec. 22.12}$$

En el punto D cristaliza el resto a diópsido junto con toda la anortita. Ya no hay líquido presente:

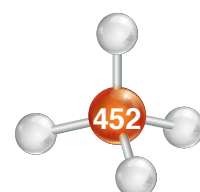
$$T: 1250^{\circ}\text{C} \quad X_D = X_L 0.00 \text{ wt\%} + 1.0 X_S (20 \text{ wt\% An} + 80 \text{ wt\% Di}) \dots\dots\dots \text{Ec. 22.13}$$

Al bajar la temperatura, pasando por el punto A al C, el sólido va incrementando de 0.00 a 43.00 wt% diópsido, representadas por las ecuaciones 22.10 y 22.12. Si comparamos los puntos A y D, la composición inicial líquida, dada por la ecuación 22.10, es igual a la composición final sólida de la ecuación 22.13, pero a 250°C más baja.

Se analiza ahora el punto isobárico “e” o eutéctico. Al bajar la temperatura del punto C a D cristaliza todo el líquido residual en el punto “e” eutéctico. La composición del líquido en el eutéctico es: 58% diópsido y 42% anortítica, a una temperatura de 1274°C y 1 bar de presión. Usando los procedimientos de cálculo arriba empleados y asumiendo una temperatura infinitesimal arriba de e = 1274°C, se tiene que:

$$20/42 X_L (58 \text{ wt\% Di} + 42 \text{ wt\% An}) + 22/42 X_S (100.00 \text{ wt\% Di} + 0.00 \text{ wt\% An})$$

Que es igual al 52.38 wt% diópsido como mineral, más 27.62 wt% diópsido y 20.00 wt% anortita como líquido. La suma del líquido y el sólido debe ser el 100 wt%.





Si la temperatura es infinitesimal, debajo de la temperatura isobárica eutéctica, la ecuación es igual a la ecuación 22.13:

$$X_L (0.00 \text{ wt\%}) + X_s (20 \text{ wt\% An} + 80 \text{ wt\% Di}) \dots\dots\dots \text{Ec. 22.14}$$

Así, cristaliza todo el líquido con una composición de 27.62 wt% de diópsido y 20.00wt% de anortítica.

Del diagrama de la Figura 22.4 se observa que existen dos casos: el primero donde cristaliza el diópsido y sigue el tren de cristalización A al D y un segundo caso en donde primero cristaliza la anortita representado por el tren II a III. Se considera la densidad del diópsido de 3.28 y de la anortita de 2.76 y la densidad de los líquidos resultantes A  $\{X_L (20 \text{ wt\% An} \text{ y } 80\text{wt\% Di})\}$  es (poco menor) alrededor de  $3.17 \text{ g/cm}^3$  y el punto I  $\{X_L (30\text{wt\%Di} + 70\text{wt\%An})\}$  cercano a  $2.91 \text{ g/cm}^3$  representados en la Figura 22.4, se propone un modelo que se ilustra en la Figura 22.5. Se supone que en nuestro modelo tenemos dos líquidos A y I como se ilustra en la Figura 22.4. Estos líquidos son producto de la fusión parcial del manto generados a diferente profundidad con distinta composición y llegan a posicionarse cada uno debajo de la interfase manto litosférico - corteza inferior. Se asume que el manto litosférico presenta una densidad de  $3.4 \text{ g/cm}^3$  y la corteza inferior una densidad de  $3.0 \text{ g/cm}^3$ , como se señala en la Figura 22.5. En el primer caso, el líquido A no es capaz de emplazarse en la corteza inferior, debido a que ambos muestran una densidad similar ( $\Delta\rho = 0.24 \text{ g/cm}^3$ ). En el caso de enfriarse este magma antes de llegar a la temperatura eutéctica, los cristales de diópsido se asientan hacia el manto litosférico, como se muestra en la Figura 22.5a. En el segundo caso, punto I, la densidad si es más baja ( $\Delta\rho = 0.09 \text{ g/cm}^3$ ), suficiente para que el líquido magmático pueda emplazarse en la corteza inferior. Una vez posicionado el "apófisis magmático" en la corteza inferior, inicia su enfriamiento hasta alcanzar la temperatura del líquidus y empieza a cristalizar la anortita. Como los cristales son menos densos que el líquido magmático, estos migran (flotan) hacia la cúpula del "apófisis magmática", como se ilustra en la Figura 22.5b.

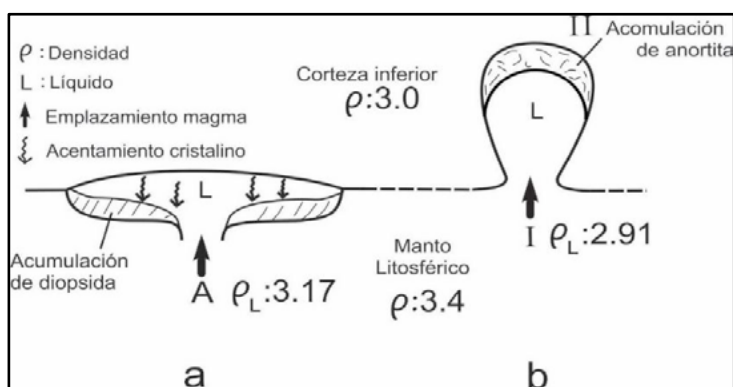


Figura 22.5 Modelo teórico que ilustra la cristalización fraccionada durante el emplazamiento y enfriamiento de un cuerpo magmático. a- Tren A al D (véase Figura 22.4): emplazamiento y posicionamiento de un líquido magmático en la interfase manto litosférico y corteza inferior, que ilustra el asentamiento cristalino de diópsido. b- Tren I al III (véase Figura 22.4): emplazamiento de un líquido magmático en la corteza inferior dando lugar a una cámara magmática, en la cual la anortita menos densa se acumula en la cúpula de la cámara magmática.

La diferencia de densidades entre el magma menos denso y la corteza inferior más densa propicia el emplazamiento del magma debido al exceso del gradiente de presión propiciado por la carga litostática de la corteza sobre el magma, mecanismo también conocido como *flotabilidad magmática*.

### 22.4.4 Sistema binario con solución sólida (SS) completa

Para el estudio de las rocas existen dos diagramas importantes. En el primero la solución sólida es simple: un elemento sustituye a otro cambiando sólo la dimensión de la celda unitaria, como en la serie continua del olivino (orthorómbico) donde las componentes son la forsterita ( $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$ ,  $v = 289.92\text{Å}^3$ ,  $\rho = 3.271$ ) y la fayalita ( $\text{Fe}_2\text{SiO}_4$ ,  $v = 301.9\text{Å}^3$ ,  $\rho = 4.66$ ). El segundo tipo de solución





sólida, llamada *compartida*, sólo puede efectuarse cuando un par de átomos con diferente valencia y radio atómico se sustituyen entre sí. La serie continua de las plagioclasas ejemplifican este caso.

### 22.4.5 Diagrama de las plagioclasas

Hacia finales del siglo XIX, el petrógrafo alemán Harry Rosenbusch (1882) observó con el microscopio petrográfico que la anortita y la bitownita frecuentemente coexisten con los piroxenos (Opx y Cpx), mientras que, con la biotita, la hornblenda con la oligoclasa y la andesina son más sódicas (Regla de Rosenbusch).

En los cursos de petrología ígnea, el estudiante inicia su conocimiento del tema con un diagrama que representa las series de N. Bowen, publicada en su famoso libro "The evolution of the igneous rocks" en 1928. De las series, por ahora nos interesa la *continua*, representada por las plagioclasas (Figura 22.6).

El diagrama, de las plagioclasas es de dos componentes ilustrada en la Figura 22.6. Su variable intensiva es la temperatura (T en la ordenada) y la extensiva la composición (X en la abscisa). Las dos componentes: la anortita y la albita forman una solución sólida completa compartida. El diagrama muestra tres campos: uno a temperaturas altas, donde el campo de líquido está limitado por la línea univariante (GL=1) del líquidus. El segundo muestra una solución sólida (SS) completa y está limitado a más alta temperatura por la línea univariante del líquidus y otra a más baja temperatura por la línea univariante del sólidus, cada una con GL=1. Este campo está definido por un vector de intercambio que, al bajar la temperatura el  $\text{Ca}^{2+}\text{Al}^3$  es intercambiado por  $\text{Na}^+\text{Si}^{4+}$ . El tercero, debajo del campo la solución sólida, está limitado por la línea univariante del sólidus.

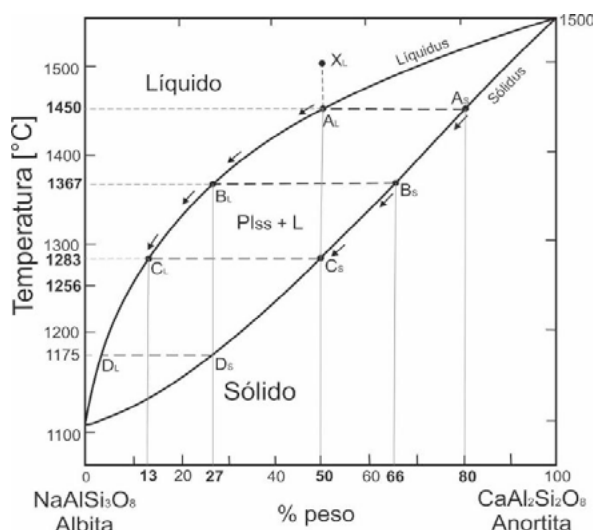


Figura 22.6. Diagrama de dos componentes con solución sólida (SS) completa entre la anortita ( $\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$ ) y albita ( $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$ ) a  $P=1\text{bar}$ . Bowen, 1928.

Se supone que un líquido de composición andesítica-labradorita representado por el (punto  $X_L$  de la Figura 22.6), presenta a 1500 °C una composición:

$$X_L = 1.0 L \text{ (50 wt\% An + 50 wt\%Ab)} \dots\dots\dots \text{Ec. 22.15}$$

Si se baja la temperatura hasta alcanzar la línea del líquidus a 1450°C, empieza a cristalizar una cantidad infinitesimal de  $\text{An}_{80}$ .

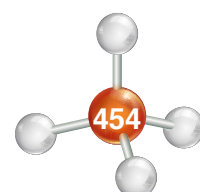
La cantidad de líquido y su composición es:

$$T = 1450^\circ\text{C}$$

$$X_A = 0.99X_L \text{ (49.99 wt\% An + 50.01 wt\% Ab)}$$

y la cantidad de sólido:

$$X_A = 0.01 X_S \text{ (80 An wt\% + 20 Ab wt\%).}$$





En el rango de temperaturas entre el punto  $A_L$  y el punto  $C_S$  ( $\Delta T = 167^\circ C$ ), en cualquier cálculo se tiene que aplicar la regla de la palanca. Se considera ahora las ecuaciones para el punto B a una temperatura de  $1367^\circ C$ . La cantidad de líquido con una composición es:

$$X_B = 16/39X_L (27 \text{ wt\% An} + 73 \text{ wt\% Ab}) = 11 \text{ wt\% An} + 30 \text{ wt\% Ab} \dots\dots\dots \text{Ec. 22.16}$$

$$X_B = 23/39X_S (66 \text{ wt\% An} + 34 \text{ wt\% Ab}) = 39 \text{ wt\% An} + 20 \text{ wt\% Ab}$$

$$X_{\text{Total,B}} = X_L + X_S = 50 \text{ wt\% An} + 50 \text{ wt\% Ab} \dots\dots\dots \text{Ec. 22.17}$$

Se nota de la ecuación 22.17 que la cantidad de líquido más el sólido suman el 100 % y la composición de ambos, líquido más sólido, presenta la misma composición inicial (punto X). La ecuación de estado es:

$$T=1367^\circ C$$

$$X_B = X_L (11 \text{ wt\% An} + 30 \text{ wt\% Ab}) + X_S (39 \text{ wt\% An} + 20 \text{ wt\% Ab}) \dots\dots\dots \text{Ec. 22.18}$$

En el punto C

Si la temperatura se encuentra por debajo de  $T_c = 1283^\circ C$ , la composición final de la plagioclasa es idéntica a la composición del líquido inicial, esta es:

$$T=1283^\circ C$$

$$X_S = 1.0 X_S (50 \text{ wt\% An} + 50 \text{ wt\% Ab})$$

El líquido, al bajar la temperatura del punto  $A_L = 50 \text{ wt\% An}$  hasta el punto  $C_L = 13 \text{ wt\% An}$ , se enriquece en albita hasta alcanzar el 87 wt% de Ab, temperatura a la cual cristaliza todo el líquido. Lo mismo sucede con los cristales de plagioclasa que se enriquecen en albita, desde el punto  $A_S = 80 \text{ wt\% An}$  hasta el punto  $50 \text{ wt\% An}$ , siguiendo la línea del sólido.

De acuerdo con el vector de sustitución de las plagioclasas, la cristalización del punto A al punto C es continua, situación en la que los minerales muestran una composición gradual y homogénea, del centro hacia la periferia. Sin embargo, en la cámara magmática las condiciones de cristalización son diferentes. Si se parte de un magma con una densidad de 2.6, los primeros cristales de bitownita presentan densidad de 2.9. Al crecer a un tamaño suficientemente grande (dependen también de la viscosidad del magma y forma del grano), empiezan a migrar por la acción de la gravedad hacia el fondo de la cámara magmática. El magma, en el lugar de cristalización en donde se separa la bitownita, se empobrece paulatinamente de la componente anortítica y el líquido magmático se vuelve cada vez más rico en la componente albítica.

Se supone que el líquido en el punto  $B_L$  de la ecuación 22.16 sobre la línea del líquido se separa completamente de los cristales de bitownita, y forma un líquido inicial del 100 wt%, equivalente al punto  $A_L$ :

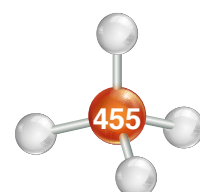
$$B_L^{41\%} = 11 \text{ wt\% An} + 30 \text{ wt\% Ab} (\text{ecuación 22.16}) \Rightarrow \text{fraccionamiento } B_S \Rightarrow B_L^{100\%} = 27 \text{ wt\% An} + 73 \text{ wt\% Ab} = B_L^F$$

$B_L = B^F$  donde la F significa fraccionamiento.

Bajando la temperatura hasta el punto  $C^F$ :

$$X_{C^F} = 23/37 X_L (13 \text{ wt\% An} + 87 \text{ wt\% Ab}) = 8 \text{ wt\% An} + 54 \text{ wt\% Ab}$$

$$X_{C^F} = 14/37 X_S (50 \text{ wt\% An} + 50 \text{ wt\% Ab}) = 19 \text{ wt\% An} + 19 \text{ wt\% Ab}$$





La composición los cristales del magma fraccionado  $C_L^F$  es 30 wt%, más pobre en la componente anortítica, comparado con la composición inicial de los primeros cristales formados en el punto As. La diferencia de temperatura entre ambos puntos es de 170°C.

Para el punto D:

27 wt% An + 73 wt% Ab =  $D_S^F$  que corresponde a una fórmula empírica:  $Na_{0.73}Ca_{0.27}Al_{1.27}Si_{2.73}O_8$  de oligoclasa.

La composición del líquido:  $X_B = 41wt\%L$  (ecuación 22.17) es igual a la  $X_B^F$  (100 wt%) a una temperatura de 1367°C, e igual a la composición del sólido (100 wt%) en el punto  $D_S^F$  a una temperatura de 1175°C. El último líquido magmático que cristaliza en el punto  $D_L^F$  muestra una composición del 94 wt% de albita y solo el 3 wt% de anortita.

### 22.4.6 Diagrama albita-feldespató potásico

Juntos, el diagrama binario de las plagioclasas (Figura 22.6) y el diagrama binario de albita y feldespató potásico (Figura 22.7) se pueden representar en un diagrama ternario Kfs-Ab-An.

A continuación, se describe el diagrama binario Ab-Kfs. Primero con una presión de agua a dos bar ( $P_{H_2O} = 2$  bar) y otro a cinco bar ( $P_{H_2O} = 5$  bar). Como se ilustra en la Figura 22.7, los dos campos de estabilidad están representados por las soluciones sólidas de albita ( $Ab_{ss} + L + V$ ) y feldespató potásico ( $Kfs_{ss} + L + V$ ). Al subir la presión de  $H_2O$ , la línea del sólidos, se une al campo llamado *solvus*. En éste, se efectúa una reacción subsólida (estado sólido) que separa o exsuelve en estado sólido un mineral homogéneo en dos: albita, rica en K y Kfs, rico en Na. La cantidad de Na o K en cada uno de los minerales depende de la presión y la cantidad de  $H_2O$  existentes en el sistema.

Considerar un punto X, ilustrado en la Figura 22.7, con una composición inicial:

$X_1$  a 990°C

$$X_1 = X_{L1} (60 \text{ wt\% Or} + 40 \text{ wt\% Ab}) + X_{S1} (0 \text{ wt\%}) \dots \text{Ec. 22.19}$$

Al bajar la temperatura hacia el punto A y el líquido se enfría rápidamente en un ambiente volcánico y la textura resultante sería una roca compuesta de vidrio o holohialina.

Si la temperatura baja 110°C, inician a cristalizar las primeras fases sólidas de ortoclasa:

A = 880°C

$$X_A = L_A 0.99 (59.9 \text{ wt\% Or} + 39.99 \text{ wt\% Ab}) + S_A 0.01 (93 \text{ wt\% Or} + 7 \text{ wt\% Ab})$$

En el punto B ubicado en el campo  $Or_{ss} + L + V$ , la cantidad de ortoclasa cristalizada en equilibrio muestran una composición:

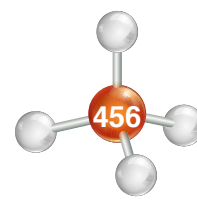
T = 790°C

Redondeando los cocientes:

$$X_B = 0.01 L_B (37 \text{ wt\% Or} + 63 \text{ wt\% Ab}) + 0.99 S_B (61 \text{ wt\% Or} + 39 \text{ wt\% Ab})$$

Si el líquido junto con los sólidos es expulsado hacia la superficie durante el trayecto de cristalización A – B, la textura resultante sería un vitrófido con cristales de ortoclasa como se muestra en la Figura 22.7c

En el punto C, a una temperatura de 700°C, cristaliza una fase homogénea de ortoclasa con el 40 % de albita, como se muestra en la Figura 22.27c.



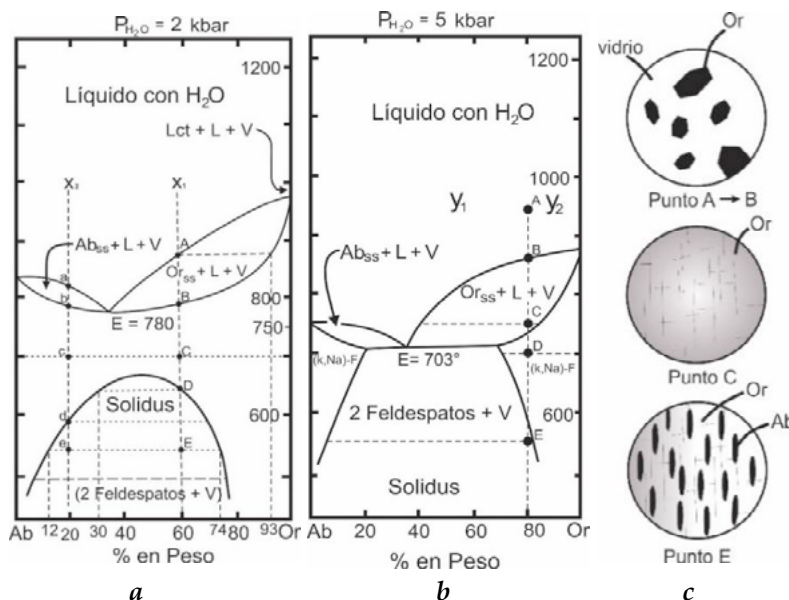


Bajando la temperatura de 640°C en el punto D, inicia a la ex-solución de albita de la ortoclasa y en el punto E, a 500°C, se forma una mesopertita (Figura 22.7c).

El porcentaje de cada componente de la textura mesopertítica y la composición de la ortoclasa y de la pertita es la siguiente:

Ortoclasa, 74 wt% con una composición de Or<sub>74</sub> o Ab<sub>26</sub> con el 26 wt% lamelas de exsolución de albita con una composición de Ab<sub>88</sub> o Or<sub>12</sub>.

Figura 22.7. Diagramas de fase binario de la albita ortoclasa: a P<sub>H<sub>2</sub>O</sub> = 2 kbar, b =H<sub>2</sub>O = 5kbar. Or<sub>ss</sub>: solución sólida de la ortoclasa, L: líquido y V: fase vapor. La figura c representa las texturas de acuerdo con los puntos de cristalización punto A al B: vitrificado de ortoclasa, C: feldespato potásico: 60% Or y 40% Ab y E: pertita de Kfs. Véase la forma cristalina de la ortoclasa del vitrificado A al B, a comparación con las lamelas de exsolución de la albita en el punto E. (Modificado y añadido de Bowen & Tuttle, 1950).



### 22.4.7 Diagrama binario con un punto peritético: fusión o cristalización incongruente

En petrología hay dos diagramas muy importantes que explican por qué algunas rocas son saturadas o sub-saturadas en cuarzo. En rocas saturadas con SiO<sub>2</sub>, el cuarzo puede coexistir con la ortoclasa en rocas ácidas, o la enstatita en rocas intermedias. Minerales como la leucita y la forsterita sólo se encuentran en equilibrio en soluciones silicatadas sub-saturadas en cuarzo. Los siguientes diagramas binarios tienen como componentes, precisamente, uno el cuarzo con la leucita y el otro el cuarzo con la forsterita.

### 22.4.8 Diagrama binario cuarzo – leucita

El diagrama isobárico cuarzo-leucita (Figura 22.8) contiene dos campos: en el primero, a más alta temperatura (arriba de 1150°C), la leucita se encuentra en equilibrio: primero con el líquido silicatado y segundo, debajo de esta temperatura, la leucita coexiste con el feldespato potásico con un contenido del 22% de SiO<sub>2</sub> y 88% de leucita. Otros tres campos saturados con SiO<sub>2</sub> que coexisten con el líquido silicatado son la cristobalita más el líquido, hasta 1470°C, tridimita más fundido hasta 990°C y feldespato potásico más fundido entre 1150° y 990°C. El último campo saturado con SiO<sub>2</sub> es el de feldespato potásico más tridimita.

El campo leucita, más fundido, rebasa el campo de saturación de SiO<sub>2</sub> (con 42 wt% SiO<sub>2</sub>), por lo que una roca con textura vitriofírica con leucita no necesariamente es subsaturada pero sí, el vidrio “congelaría” a una temperatura más alta que 1150°C.

Para la fusión incongruente (Figura 22.8a), analizaremos dos trenes de cristalización, el primero subsaturado y el segundo inicia con una composición “subsaturada” que posteriormente, al fraccionarse el sólido, cambia a saturada en SiO<sub>2</sub>. En los dos trenes están en condiciones





isobáricas, la temperatura baja de acuerdo con los puntos:  $A \Rightarrow B \Rightarrow P' \text{ (infinitesimal)} \Rightarrow P'' \Rightarrow C$  y  $A \Rightarrow$  extracción del líquido  $B' \Rightarrow P' \text{ (infinitesimal)} \Rightarrow P'' \Rightarrow C' \Rightarrow D'$ .

Tren subsaturado de cristalización  $A \Rightarrow B \Rightarrow P' \text{ (infinitesimal)} \Rightarrow P'' \Rightarrow C$ .

Se inicia con una temperatura de 1750°C indicado por el punto "A" y un líquido subsaturado de SiO<sub>2</sub> con una composición: 90 wt% de leucita y 10 wt% de SiO<sub>2</sub>.

En el punto B la temperatura es de 1400°C y la ecuación es:

$$X_B = 10/30 L \text{ (70 wt\% Lc + 30 wt\% Q)} = 23.3 \text{ wt\% Lc} + 10 \text{ wt\% Q}$$

$$X_B = 20/30 S \text{ (100 wt\% Lc)} = 66.7 \text{ wt\% Lc}$$

$$X_B = X_L \text{ (23.3 wt\% Lc + 10 wt\% Q)} + X_s \text{ (66.7 wt\% Lc)} \dots\dots\dots \text{Ec. 22.20}$$

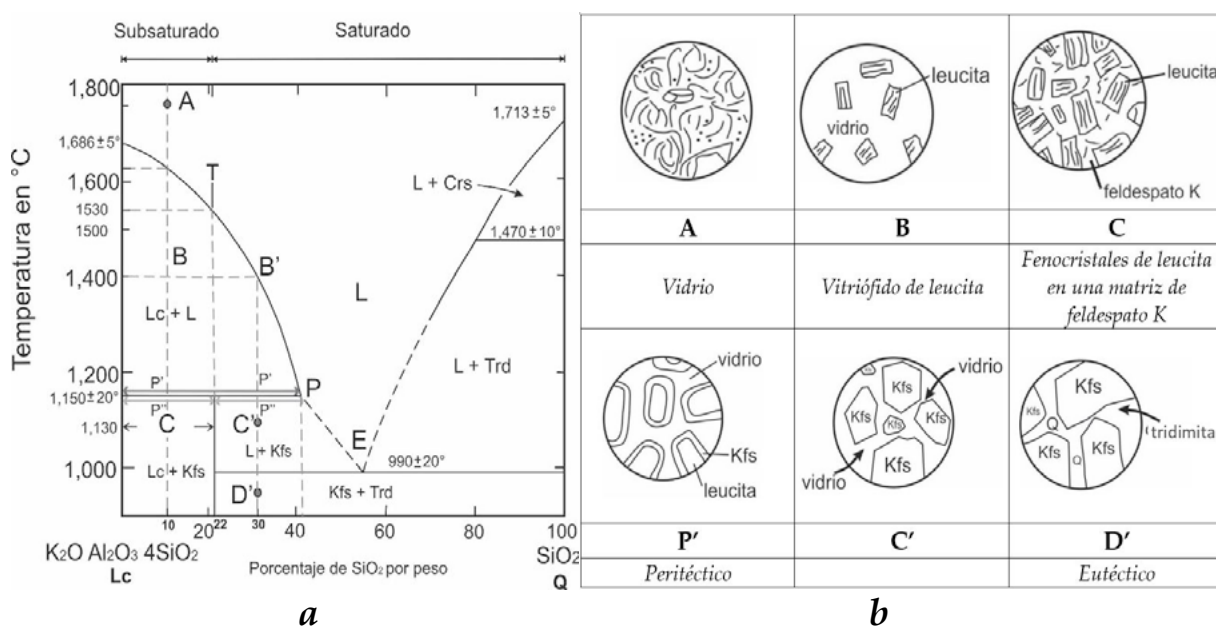


Figura 22.8. **a.**- Diagrama binario leucita cuarzo; Bowen & Tuttle 1950. L: líquido, Trd: tridimita, Kfs: feldespato potásico, Lc: leucita, Q: cuarzo y Crs: cristobalita. **b.**- Texturas correspondientes a los puntos B, C, D, P, C' y D del diagrama.

Ahora, si bajamos la temperatura 270°C hasta llegar al punto C., en este punto cristaliza todo el feldespato potásico formando cristales pequeños entre los cristales grandes de leucita. Nótese que durante la cristalización de la ortoclasa en el punto P'-PP'' a 1150+/-20°C peritético, el 12.5 wt% de leucita reaccionó con el líquido para formar la ortoclasa:

$$T = 1130^\circ\text{C}$$

$$X_C = X_s \text{ (54.5wt\% Lc + 45.5 wt\% Kfs)} \dots\dots\dots \text{Ec. 22.21}$$

La composición resultante equivale a una roca ígnea volcánica llamada fonolita de leucita.

Las texturas resultantes de un líquido en enfriamiento del punto A al C están representadas en la Figura 22.8b. La primera muestra A está compuesta de vidrio con una composición equivalente a la ecuación del 90 wt% de leucita y 10 wt% de SiO<sub>2</sub>. La segunda textura B, los cristales de leucita están rodeados por vidrio dando como resultado una textura vitofírica con una composición aproximada de la ecuación 22.19. La textura del punto C representaría el equivalente plutónico de una fonolita de leucita llamada monso-sianita de feldespatoide.





Analicemos el tren:  $A \Rightarrow$  extracción del líquido  $B' \Rightarrow P's$  (infinitesimal)  $\Rightarrow P''s \Rightarrow C' \Rightarrow D'$ .

Como se puede apreciar de la Figura 22.8a, en el punto A la composición del líquido es igual a la del tren de cristalización previamente descrito. Bajando la temperatura hasta el punto B representado por la ecuación 22.19 y extraemos este líquido para formar el 100wt%, el tren de enfriamiento se recorre hacia la derecha del diagrama para enriquecerse un 20 wt% más de  $SiO_2$ . De esta manera el líquido resultante está saturado de sílice y recorriéndose del punto B al  $B'$ . En el  $B'$ , el líquido a  $1400^\circ C$  por lo tanto presenta la siguiente composición:

$$X_{B'} = X_L (70wt\% Tri + 30wt\% Lc) \dots\dots\dots Ec. 22.22$$

Se observa qué sucede en el punto "P" peritético. Supongamos que la temperatura es infinitesimalmente superior a la temperatura peritética  $P'$  de  $1150^\circ C$  (suponiendo que es exacta). La ecuación es:

$$T=1149.99$$

$$X_{P'} = X_L (41 wt\% Lc + 30 wt\% Q) + X_s (29 wt\% Lc) \dots\dots\dots Ec. 22.23$$

Calculando la ecuación para una temperatura infinitesimalmente más baja que la temperatura peritética:

$$X_{P''} = X_s (91 wt\% Kfs + 9wt\% Tri) \dots\dots\dots Ec. 22.24$$

Nótese que para los campos  $Kfs + L$ ,  $Kfs + Tri$ ,  $tri + L$  y  $Crs + L$ , en la Figura 22.8a., el feldespato K está compuesto por 22 de tridimita y 78 de leucita, equivale al 100 wt% de ortoclasa.

Así, al bajar la temperatura de una infinitesimalmente arriba de la temperatura peritética a una temperatura infinitesimalmente abajo, todo el líquido cristaliza el 91wt% de feldespato potásico y 9wt% de cuarzo. La reacción incongruente a partir de una solución silicatada saturada es:

$$X_{P'} \Rightarrow X_{P''} = X_L (41 wt\% Lc + 30 wt\% Q) + X_s (29 wt\% Lc) \Rightarrow X_s (91 wt\% Kfs + 9wt\% Tri) \dots\dots Ec. 22.25$$

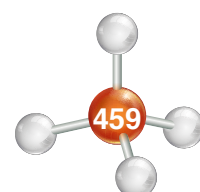
Así, el 29wt% Lc sólida reaccionó con el líquido para formar el feldespato potásico, más aquel que cristalizó del líquido, dando como resultado a una traquita de feldespato potásico. De acuerdo a la ecuación 22.24 podemos concluir que, en un punto peritético, la reacción es incongruente, isobárica e isotérmica. Una textura característica con una reacción incongruente se ilustra en la Figura 22.8b punto  $P'$ , donde la leucita muestra bordes de reacción a ortoclasa llamadas *coronas primarias de reacción incongruente*. Algunas de las texturas resultantes del tren saturado de  $SiO_2$  se muestran en la Figura 22.8b a partir del punto A,  $C'$  y  $D'$ .

## 22.5 Sistemas de tres componentes

### 22.5.1 Regla de la palanca aplicada a sistemas ternarios

Antes de iniciar con la interpretación gráfica de los diagramas, es necesario precisar cómo podemos cuantificar las fases presentes en un punto dado.

La Figura 22.9 muestra un diagrama ternario: cada vértice está representado con el 100% de cada componente A, B y C. Cada arista representa un diagrama binario y el contenido de cada componente se lee de la misma manera. La arista B-C opuesta al vértice A, contiene el 0.0% de la componente A y su contenido aumenta conforme nos acercamos al vértice. De igual forma opera el contenido de la componente B, que es igual a cero en la arista A-C y C igual a cero en la arista A-B.





Analicemos la regla de las fases de Gibbs de acuerdo con la superficie del líquidus, la línea cotéctica y el eutéctico triple. El número de componentes es tres, por lo tanto, cualquier superficie está representada por una fase:

$$GL = C - F + 2 = 3 - 2 + 2 = 3 \dots\dots\dots \text{Ec. 22.26}$$

Como la presión es constante, podemos variar la temperatura y la composición sin perturbar la coexistencia de las fases y el líquido. Al analizar las líneas cotécticas, las cuales también se interpretan como un *valle térmico*, observando que coexisten dos fases:

$$GL = 2 - 2 + 3 = 2 \dots\dots\dots \text{Ec. 22.27}$$

Nuevamente como la presión es constante, el grado de libertad es igual a 1 o univariante. Cuando las tres superficies divariantes se intersecan formando un punto, la temperatura ya no puede variar y la presión necesariamente debe ser constante, el eutéctico triple forma un punto invariante con cero grados de libertad. Pueden, así, coexistir las tres fases sólidas.

Suponiendo que tenemos una roca con composición X. Para obtener la relación en ese punto de las componentes A, B y C, el primer método consiste en dibujar líneas paralelas a las aristas del triángulo que pasen por el punto X (líneas punteadas). La lectura se hace directamente sobre las aristas como lo indican los corchetes en la Figura 22.9.

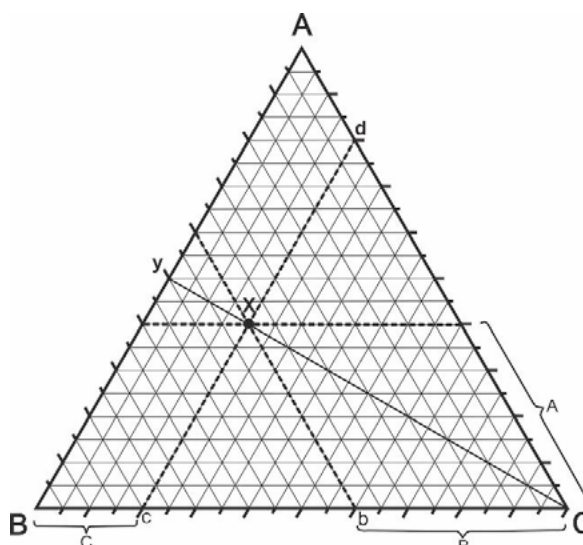


Figura 22.9. Diagrama ternario que ilustra cómo obtener la composición de una fase en un sistema de tres componentes.

Por este método obtenemos:

$$A = 40 \text{ wt\%}, B = 40 \text{ wt\%} \text{ y } C = 20 \text{ wt\%}.$$

El segundo método o regla de la palanca, consiste en dibujar una línea a partir del vértice elegido C que incluya el punto X hasta intersectar en el punto "y" sobre la arista A-B. Esta intersección sobre la arista A-B nos ayuda a obtener la composición binaria de A y B. Ahora, si proyectamos una línea c-d paralela a la arista A-B, podemos obtener la proporción correspondiente a la componente A y B respectivamente y la composición de C. Usando la regla de la palanca:

$$C = Xy/Cy = 20/100 = 0.2 \dots\dots\dots \text{Ec. 22.28}$$

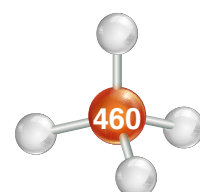
Como la arista que escogimos es la C = 100 wt% tenemos:  $C = 0.2 \times 100 \text{ wt\%} = 20 \text{ wt\%}$

Sabemos que la arista de las componentes A-B muestran una composición del 50 wt% cada una, de tal manera que las componentes A y B se pueden obtener con la contraparte de la palanca, así:

$$A = XC/Cy \text{ (50wt\% A)} = 80/100 \text{ (50wt\% A)} = 40 \text{ wt\%} \dots\dots\dots \text{Ec. 22.29}$$

$$B = XC/Cy \text{ (50wt\% B)} = 80/100 \text{ (50wt\% B)} = 40 \text{ wt\%} \dots\dots\dots \text{Ec. 22.30}$$

Con ambos métodos se llega al mismo resultado. Aparentemente el segundo método es más complicado, sin embargo, es lo contrario, ya que sólo necesitamos proyectar una línea (Cy) para obtener toda la información. Además, este método nos ayuda a obtener más rápidamente las proporciones del líquidus y del sólidus, cada uno con su composición de acuerdo con las





componentes en las aristas. Importan hacer notar que los cálculos pueden ser desarrollados en cualquier tipo de triángulo no equilátero.

### 22.5.2 Diagrama forsterita-diópsido-piropo, un ejemplo de fusión del Manto

Ahora ya podemos iniciar con un diagrama ternario simple que representa la composición teórica del manto superior (compuesto, para nuestro análisis, por un manto primitivo). En este caso explicaremos como pueden generarse magmas básicos a partir de la fusión parcial de un manto superior, compuesto por Fo (forsterita)-Di (diópsido)-Prp (piropo) como se ilustra en la Figura 22.10. Esta composición es equivalente a presiones de 40 Kbar, o 130 Km de profundidad libres en H<sub>2</sub>O, propuesto por Yoder (1976).

El diagrama ternario Di-Pyr-Fo (Figura 22.10) representa la superficie del líquidus subdividida por tres líneas cotécticas que convergen en un punto invariante que representa una mínima temperatura de 1670°C. Las líneas sólidas (como curvas topográficas), sensiblemente paralelas entre si y que se propagan perpendicularmente de los vértices con intervalos de temperatura de 50°C, se conocen como *líneas isotérmicas* y convergen a una mínima temperatura E<sub>i</sub> eutéctica triple. Las aristas del triángulo representan las líneas del líquidus, cada una con un eutéctico, y los vértices el 100% de cada componente. Sin embargo, como se trata de la fusión parcial del manto, que inicia con la fusión parcial en el punto invariante E<sub>i</sub> (E de eutéctico y el subíndice "i" de invariante) que indica la composición inicial del líquido eutéctico o "seudo-eutéctico" con una composición que engloba toda el área de este diagrama. Considerando el ejemplo donde la roca que compone al manto es una peridotita de granate con una composición indicada por X en el diagrama (Figura 22.10):

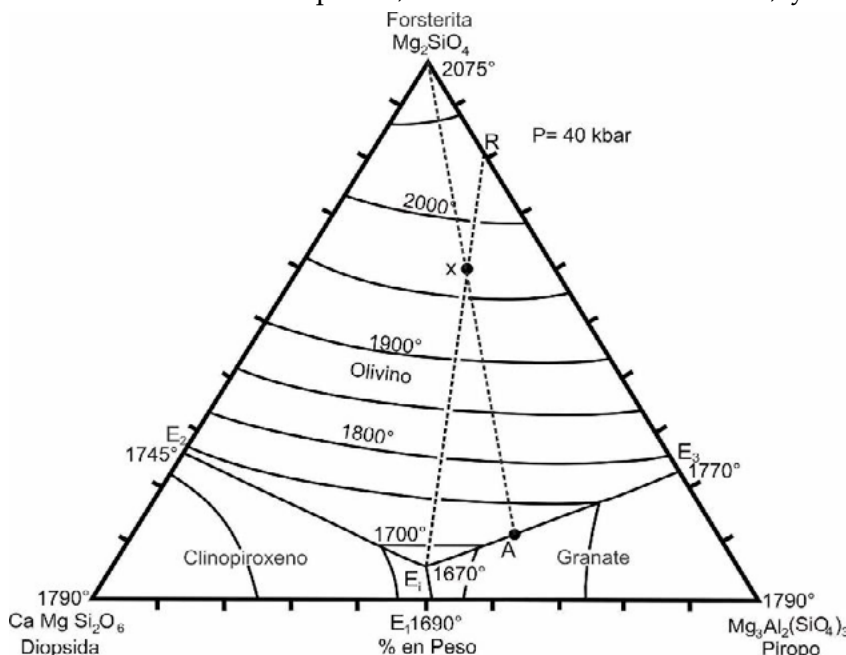


Figura 22.10. Sistema ternario Forsterita-diópsida-piropo. Yoder, 1976.

T = 1960°C

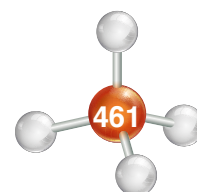
$$X_x = X_s (60 \text{ wt\% Fo} + 15 \text{ wt\% Di} + 25 \text{ wt\% Prp}) \dots \text{Ec. 22.31}$$

Al subir la temperatura poco arriba 1670°C, en el punto triple E<sub>i</sub> (donde convergen las tres líneas cotécticas) se forma el primer líquido magmático resultado de la fusión de todo el diópsido junto con algo de forsterita y piropo, hasta alcanzar el 30wt% de magma, quedando una roca residual compuesta de forsterita y piropo:

T = 1670°C

Punto E<sub>i</sub>:

$$X_{E_i} = X_L 0.30 (7 \text{ wt\% Fo} + 49 \text{ wt\% Di} + 44 \text{ wt\% Prp}) + X_s 0.70 (82 \text{ wt\% Fo} + 18 \text{ wt\% Prp})$$





Redondeando fracciones:

$$X_{Ei} = X_L(2.0 \text{ wt\% Fo} + 15.0 \text{ wt\% Di} + 13.0 \text{ wt\% Prp}) + X_s(58 \text{ wt\% Fo} + 12.0 \text{ wt\% Prp}) \dots \text{Ec. 22.32}$$

Los valores de la ecuación son aproximados y la suma de la composición  $X_L$  y  $X_s$  es igual al 100 wt% y es la misma que la inicial  $X_x$ . Sin embargo, al subir rápidamente la temperatura y se extrae del sistema todo el líquido, la composición  $X$  inicial invariablemente tiene que cambiar. Así, al separarse el fundente de la roca residual, la composición inicial  $X$  cambia siguiendo la línea  $E_i - R$  hasta llegar a  $R$ . La composición del líquido  $E_i$  queda constante a una temperatura de 1670°C hasta que toda la fracción cristalina diopsídica es totalmente consumida como lo indica la ecuación 22.31. Al llegar al punto  $R$ , el diagrama ternario cambia a uno binario, representado por las componentes  $Fo-Prp$  y un eutéctico  $E_3$ .

El magma generado se enriquece en elementos incompatibles como el  $K$ ,  $Na$ ,  $Ba$ ,  $Rb$ ,  $Sr$ ,  $Ti$ ,  $Zr$ ,  $Hf$ ,  $U$ ,  $Pb$ ,  $Th$  y  $TRL$  (tierras raras ligeras), dejando la fracción cristalina restítica rica en  $Cr$ ,  $Ni$  y  $TRP$  (Tierras Raras Pesadas).

Esta cantidad de magma (con una densidad menor de 3.4) es suficiente para desprenderse de la roca residual (con una densidad alrededor de 4) y emplazarse en niveles mantíferos más someros o en la corteza inferior más fría, para cristalizar como una roca clinopiroxenita empobrecida en  $TRP$ .

Una vez fundida toda la componente diopsídica y luego subir la temperatura, el líquido cambia su composición a lo largo de la línea cotéctica  $E_i - E$  hasta alcanzar el punto  $A$ , en el cual toda la componente de piropro pasó a formar parte del líquido  $X_L$ , coexistiendo con la componente forsterítica restítica  $X_s$ . Para el punto  $A$  existen dos casos:

En el primero, de no extraer el líquido de la fusión en el punto  $E_i$ , para el punto  $A$ :

$$T = 1716^\circ\text{C}$$

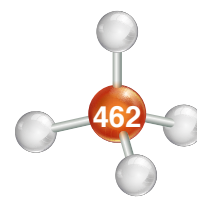
$$X_A = X_L(6 \text{ wt\% Fo} + 15 \text{ wt\% Di} + 25 \text{ wt\% Prp}) + X_s(54 \text{ wt\% Fo}) \dots \text{Ec. 22.33}$$

El sólido residual compuesto solo por forsterita forma una dunita. Para el segundo caso, si se extrae todo el líquido generado en el punto  $E_i$ , la ecuación 22.32 se le resta la ecuación 22.31 o sea el 16 wt% ( $4 \text{ wt\% Fo} + 12 \text{ wt\% Prp}$ ) de sólido que se fundió para formar un líquido con el mismo peso, redondeando fracciones:

$$X_A = X_L(7 \text{ wt\% Fo} + 12 \text{ wt\% Prp}) + X_s(53 \text{ wt\% Fo}) + \text{extraído}(15 \text{ wt\% Di} + 13 \text{ wt\% Prp}) \dots \text{Ec. 22.34}$$

En el primer caso, conforme se funde el piropro y se mezcla con el líquido rico en la componente diopsídica, el líquido magmático generado se enriquece sucesivamente en tierras raras pesadas, dejando la fracción cristalina restítica rica en  $Cr$  y  $Ni$ . En el segundo, el líquido magmático queda aún más rico en estos elementos.

La *fusión batch* (fusión completa de la roca en un solo evento) en el punto  $X$  de la Figura 22.10, necesita una temperatura por lo menos de 1960°C. Cuando opera la fusión fraccionada, el calor generado debe alcanzar una temperatura mayor de los 2075°C. Debido a la diferencia de temperatura que existe entre el líquidus y el sólidus, la roca difícilmente llegará a fundirse totalmente. Por esta razón, es casi imposible que la composición de un magma pueda generarse con una composición inicial  $X$ . Para explicar la amplia variación de composición de las rocas máficas en la corteza, es necesario acudir a la fusión parcial. Este mecanismo abre la posibilidad de generar magmas con diferente composición que aquella inicial  $X$  a lo largo del punto eutéctico







triple (invariante) hasta llegar al punto A y si la temperatura es muy alta, posiblemente algunos magmas puedan generarse entre las isoterms de 1716°C y 1800°C.

### 22.5.3 Diagrama dióxido-forsterita-SiO<sub>2</sub>

Este importante diagrama isobárico (Figura 22.11) a un 1 bar, fue elaborado experimentalmente por primera vez por Andersen (1915) y más tarde reelaborado por Grieg (1927). Los magmas que cristalizan a partir de esta composición son toleíticos y no son comunes en México como los calcalcalinos. Sin embargo, es un diagrama que ilustra de manera sencilla el concepto de cristalización incongruente.

El diagrama está definido por las siguientes fases: forsterita (Fo), 2MgO\*SiO<sub>2</sub>, anortita (An) CaO\*Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>\*2SiO<sub>2</sub> y cristobalita-tridimita, SiO<sub>2</sub>. La superficie está dividida en dos triángulos: Fo – An – En (subsaturado en sílice) y En – An – SiO<sub>2</sub> (saturado en sílice). A continuación, se describe la cristalización a partir de dos líquidos magmáticos, uno en cada subtriángulo. Son cinco las superficies líquidas divariantes nombrada cada una por el primer mineral que cristaliza a partir de esta superficie líquida, excepto una, que divide a la superficie de la forsterita pasando por la de la anortita hasta el vértice de la An. Las cinco superficies divariantes están limitadas por valles cotéticos (F'' - F, F' - F, F - P', E - E', P' - E' y E'' - E'). La línea F-P', de F hasta la línea punteada, indica que la cristalización es congruente y, al aumentar la concentración de SiO<sub>2</sub>, la cristalización se vuelve incongruente hasta alcanzar la línea P-P' en el punto P'. Este cambio (ver superficie en el diagrama), conforme baja la temperatura, aumenta la concentración de SiO<sub>2</sub> en el líquido magmático, propiciando el cambio de un líquido subsaturado a uno saturado o, dicho de otra manera, toda la forsterita cristalizada cambia a enstatita. Esta es la razón por la cual el diagrama se denomina de *cristalización incongruente*.

Las tres fases calculadas se ubican en el diagrama usando el triángulo Fo - An - En.

La proporción An y En se lee sobre la línea P-An.

Una vez ubicada la composición del líquido en el diagrama (figura 22.11a), Fo-An-SiO<sub>2</sub> a presión constante representada con la letra X''. La composición del líquido es:

$$T=1450^{\circ}\text{C}$$

$$X_x = X_L (23 \text{ wt\% Fo} + 32 \text{ wt\% En} + 45 \text{ wt\% Pl}) + X_s (0.00 \text{ wt\%}) \dots\dots\dots \text{Ec. 22.35}$$

Si consideramos las tres componentes SiO<sub>2</sub>-Fo-An, la composición aproximada equivalente es:

$$T=1320^{\circ}\text{C}$$

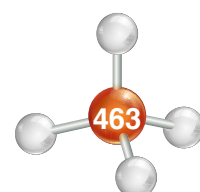
$$X_c = X_L (10\text{wt\% SiO}_2 + 45 \text{ wt\% Pl} + 45\text{wt\% En}) \dots\dots\dots \text{Ec. 22.36}$$

Al bajar la temperatura perpendicular (a la página del libro) hasta intersectar la superficie divariante a 1425°C, empiezan a cristalizar los primeros cristales de forsterita. Al bajar más la temperatura, la composición del líquido se enriquece fuertemente en anortita siguiendo la línea X-S. En el punto S'', a 1320°C, ubicado sobre la línea cotética univariante F-P', usando la regla de la palanca la composición líquida-sólida, resulta que:

$$T=1320^{\circ}\text{C}$$

$$X_c = X_L 0.78 (58 \text{ wt\% Pl} + 42\text{wt\% En}) + X_s 0.22 (100 \text{ wt\% Fo})$$

En este punto, el líquido está saturado con polímeros que formarán cristales de anortita a punto de cristalizar. Si este magma es expulsado a la superficie, de la corteza terrestre, la roca tendrá una textura vitroífrica con fenocristales de forsterita (véase 22.11.b. tren X, punto X → X<sub>c</sub>)





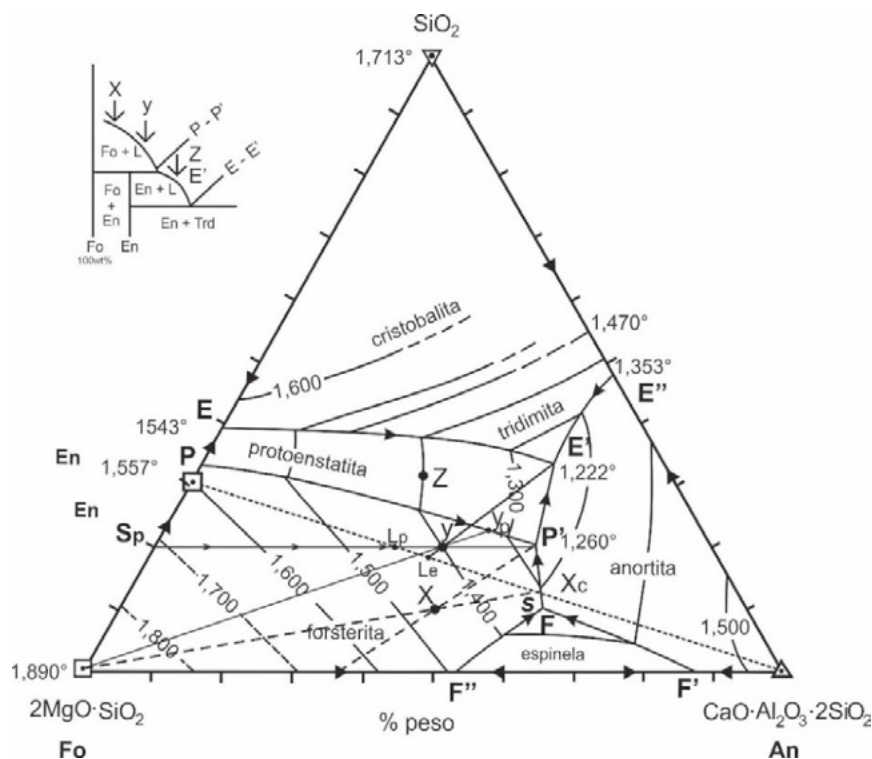


Figura 22.11a. Diagrama ternario que ilustra el sistema SiO<sub>2</sub>-forsterita-anortita (Anderson, 1915, en Muan A., 1979). La figura de la esquina superior izquierda muestra el diagrama binario Fo - SiO<sub>2</sub> equivalente a la arista Fo - SiO<sub>2</sub> del diagrama ternario.

Tren X		
1300°C 		
Punto X → X <sub>C</sub> An 23% - vidrio 77%	Punto X <sub>C</sub> → P' An 18% - Fo 32% - vidrio 50%	Punto P' Fo 23% - En 32% - An 45% (Ec. 22.37)
Tren Y		
1330°C 		1260°C 
Y <sub>p</sub> Fo 12% - vidrio 88%	S <sub>p</sub> → L <sub>p</sub> Texturas coroníticas: Fo reacciona con el líquido para formar En.	P' Em + vidrio.
1260°C 		
P' → E' Cristaliza la An más un poco de En. 40 wt%En + 23wt%An + 37wt%vidrio		E' 54 wt%En + 42wt% An + 4wt% Tri. (Ec. 22.42)

Figura 22.11b Texturas que se forman durante el enfriamiento de los dos trenes X y Y de la figura a.



Una vez alcanzada la temperatura de 1320°C en el punto S'', empieza a cristalizar la anortita siguiendo la línea cotéctica P-P', hasta alcanzar el punto peritético P':

$$T=1260^{\circ}\text{C}$$

$$X_P = X_L 0.50 (20 \text{ wt\% SiO}_2 + 25 \text{ wt\% Fo} + 55\text{wt\% An}) + X_s 0.50 (64 \text{ wt\% Fo} + 36\text{wt\% An})$$

Ver Figura 22.11b.

Simplificado y redoneado:

$$X_P = X_L (10 \text{ wt\% SiO}_2 + 13\text{wt\% Fo} + 27\text{wt\% An}) + X_s (32\text{wt\% Fo} + 18 \text{ wt\% An}) \Leftrightarrow X_s (23\text{wt\% Fo} + 32\text{wt\% En} + 45\text{wt\% An}) \dots\dots\dots \text{Ec. 22.37}$$

La textura entre los puntos  $X_C \rightarrow P'$  representa un vitrificado de anortita y forsterita. El punto P' equivale a una roca gabrónica con fenocristales anedrales de olivino a su vez rodeados por anortita con cristales grandes y chicos y la enstatita en forma intersticial, ilustrados en la Figura 22.11b tren  $X \rightarrow X_C$ ,  $X_C \rightarrow P'$  y P'.

Al disminuir la temperatura debajo de 1260°C, del 32 wt % de forsterita, el 9 wt% que cristalizó en exceso antes de la temperatura peritética, reacciona con el líquido peritético invariante P', más el 13 wt% de forsterita y 10wt% enstatita en el líquido, suman el 32 wt% de enstatita en la roca.

El escenario anterior el tren de cristalización es bajo condiciones subsaturadas de SiO<sub>2</sub> y se omite la presencia de FeO, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Na<sub>2</sub>O, K<sub>2</sub>O más H<sub>2</sub>O y otros como TiO<sub>2</sub>, Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>.

Si se añade un 8 wt% de SiO<sub>2</sub>, proyectando a partir del vértice SiO<sub>2</sub>, la composición resultante queda ubicada en el punto Y'', localizado en el triángulo En-An-SiO<sub>2</sub>. Como se desprende de la Figura 22.11a el punto ubica sobre la superficie del campo sombreado, limitado por la línea discontinua peritética P - An, al valle cotéctico P-P en el campo forsterita–espinela–anortita–protoenstatita, esta es:

$$T:1.400^{\circ}\text{C}$$

$$X_Y = Y_L (38 \text{ wt\% Fo} + 42\text{wt\% An} + 20 \text{ wt\% Tri}) \dots\dots\dots \text{Ec. 22.38}$$

Al bajar la temperatura intersecta la superficie el líquido a 1400°C e inicia la cristalización de forsterita hasta llegar a la línea peritética P-P', en este punto Y<sub>p</sub>, igual al ejemplo anterior, inicia la cristalización de la forsterita. La composición del *liquidus* y del *sólidus* a una temperatura aproximada de 1330°C es:

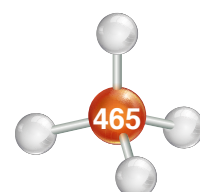
$$T:1330^{\circ}\text{C}$$

$$X_{Y_p} = X_L 0.88 (30\text{wt\%Fo} + 46\text{wt\%An} + 24\text{wt\% Tri}) + X_s 0.12 (100\text{wt\% Fo}) \quad \text{ver Figura 22.11 b}$$

Redondeando:

$$X_{Y_p} = X_L (26\text{wt\%Fo} + 42\text{wt\%An} + 20\text{wt\%Tri}) + X_s (12\text{wt\%Fo}) \dots\dots\dots \text{Ec. 22.39}$$

Al interpretar la ecuación, notamos que el líquido se enriqueció en las componentes SiO<sub>2</sub> y anortita. Nótese que la textura en este punto Y<sub>p</sub> es igual a la del tren X punto X, sin embargo, la composición del vidrio resultante del líquido esta enriquecido de SiO<sub>2</sub>. Al bajar la temperatura ( $\Delta T = 70^{\circ}\text{C}$  de Y<sub>p</sub> a P') inicia a reaccionar el olivino con el SiO<sub>2</sub> (arista: Fo - Sp) para formar enstatita más la enstatita que se forma a partir del líquido, hasta que el líquido alcanza el punto triple peritético P'. Aplicando la regla de lever sobre la línea Sp -P':





T:1260°C

$$X_{P'} = X_L 0.76(24\text{wt}\% \text{Fo} + 55\text{wt}\% \text{An} + 21\text{wt}\% \text{Tri}) + X_s 0.24 (42\text{wt}\% \text{Fo} + 58 \text{wt}\% \text{En})$$

$$X_{P'} = X_L (18 \text{wt}\% \text{Fo} + 42\text{wt}\% \text{An} + 16\text{wt}\% \text{Tri}) + X_s (10\text{wt}\% \text{Fo} + 14 \text{wt}\% \text{En}) \dots \text{Ec. 22.40}$$

Llegando al punto peritético P' todo el olivino termina de reaccionar con el líquido para formar enstatita, como se ilustra en la Figura 22.11. A partir de este punto, a lo largo de la línea Sp→Lp (flechas sobre la línea) el líquido en el punto P inicia a cristalizar la anortita.

T:1260°C

$$X_{P'} = X_L 0.38(30 \text{wt}\% \text{Fo} + 48\text{wt}\% \text{An} + 23\text{wt}\% \text{Tri}) + X_s 0.62(64 \text{wt}\% \text{En} + 36\text{wt}\% \text{An}) \text{ ver Figura 22.11 b}$$

Simplificando y reordenando:

$$X_{P'} = X_L (11 \text{wt}\% \text{Fo} + 18\text{wt}\% \text{An} + 8\text{wt}\% \text{Tri}) + X_s (40 \text{wt}\% \text{En} + 23\text{wt}\% \text{An})$$

Nótese que todo el olivino desapareció en la fracción sólida, por lo tanto, la variancia se incrementa por uno.

Entre los puntos P' y E' precipita la anortita:

T:1222°C

$$X_{E'} = X_L 0.13(17\text{wt}\% \text{Fo} + 50\text{wt}\% \text{An} + 33\text{wt}\% \text{Tri}) + X_s 0.87(60 \text{wt}\% \text{En} + 40\text{wt}\% \text{An})$$

Consideremos ahora una temperatura infinitesimalmente arriba de 1222 °C:

$$X_{E'} = X_L 0.13(17 \text{wt}\% \text{Fo} + 50 \text{wt}\% \text{An} + 33 \text{wt}\% \text{Tri}) + X_s 0.87(40 \text{An wt}\% + 60 \text{En wt}\%)$$

$$X_{E'} = X_L (2.2\text{wt}\% \text{Fo} + 6.5 \text{wt}\% \text{An} + 4.3\text{wt}\% \text{Tri}) + X_s (38\text{wt}\% \text{An} + 52 \text{wt}\% \text{En}) \dots \text{Ec. 22.41}$$

Si todo el 13wt% de líquido de la ecuación 22.39 cristaliza en este punto E' más el sólido del punto Le del diagrama de la Figura 22.11, obtenemos la composición de la primera fase líquida del punto Y:

Así:  $X_Y^{T:1.400^\circ}$ : representa la composición de partida del punto Y

$X_{P'}^{T:1222^\circ \text{C}}$ : composición del primer líquido que se forma durante la fusión parcial hasta el 0.13 wt% de una roca con composición Y

Tenemos aproximadamente:

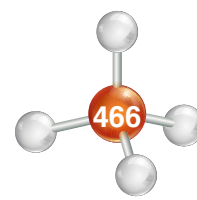
$$X_Y = X_s (38 \text{wt}\% \text{Fo} + 42\text{wt}\% \text{An} + 20 \text{wt}\% \text{Tri})$$

$$X_{E'} = X_s (54 \text{wt}\% \text{En} + 42\text{wt}\% \text{An} + 4\text{wt}\% \text{Tri}) \dots \text{Ec. 22.42}$$

Las texturas resultantes para del tren de cristalización Y, los puntos Yp, Sp→Lp, P', P'→E' y E', se pueden interpretar como se muestra en la Figura 22.11b.

### 22.5.4 Diagrama diópsido-anortita-albita, ejemplo simplificado de la cristalización de un basalto

Con el conocimiento del sistema binario diópsido (Di) - albita (An) con un punto eutéctico (Figura 22.4) y el sistema binario (Ab-An) con solución sólida completa de las plagioclasas (Figura 22.6), se puede analizar el sistema de tres componentes Di-An-Ab, el cual visualiza la cristalización de una roca basáltica a partir de un magma libre de Fe, saturado de SiO<sub>2</sub> (Figuras 22.12 y 22.13).





La Figura 22.12 muestra un diagrama de bloque simplificado con una base triangular en cuyos vértices están representadas por las componentes Di-An-Ab. Perpendicular a esta base se grafica la temperatura (T) y la presión se considera constante a 1.0 bar. Las dos superficies divariantes de líquidos, de las cuales una representa composición diopsídica (Di-E1-E2) y la otra de plagioclasa (An-Ab-E1-E2), convergen en una línea cotéctica E1 y E2 que alcanza el punto eutéctico del diagrama binario Di-Ab-T. En la línea cotéctica, que representa un valle térmico, cristalizan simultáneamente, a partir del líquido, la plagioclasa y el diópsido. Los campos, de acuerdo con la regla de las fases, tienen tres grados de libertad, ya que la presión se mantiene en forma constante, mientras que la temperatura y la composición del líquido pueden variar sin afectar la paragénesis del diópsido y la plagioclasa.

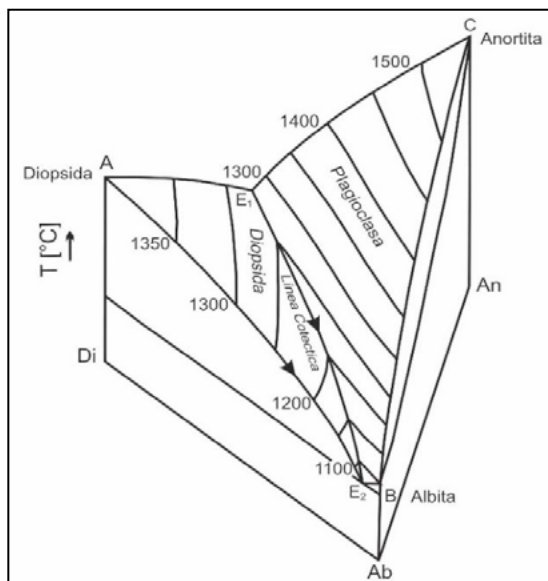


Figura 22.12. Diagrama en bloque anortita-diópsido-albita a 1 bar de presión. De Correns, 1968; tomado de Okrusch & Matthes, 2014.

$GL = C - F + 2 = 3 - 2 + 2 = 3$  ..... Ec. 22.43

Para reproducir el proceso de cristalización de una roca compuesta principalmente por estos minerales, es más fácil proyectar las superficies y la línea cotéctica sobre la superficie de la base del diagrama de bloque, resultando un diagrama ternario Di-An-Ab. En este diagrama triangular la variación de la temperatura se representa en forma de isoterma (Figura 22.13).

Considerando un magma con la siguiente composición:

$X_L = 50 \text{ wt\% Di} + 25 \text{ wt\% An} + 25 \text{ wt\% Ab}$  o  $50 \text{ wt\% Di} + 50 \text{ wt\% An}_{50}$  ..... Ec. 22.44

Al bajar la temperatura perpendicular a la superficie Di-E1-E2 hasta intersectar el punto X a una temperatura de 1275°C, comienzan a cristalizar las primeras fases de diópsido.

Del diagrama ternario de la Figura 22.13a, los puntos A, B y C sobre la línea cotéctica indican la evolución del líquido a partir de la composición X, hasta el punto C. La proyección de estos mismos puntos hacia la arista anortita-albita, representan la composición del liquidus en el diagrama ternario y binario de la Figura 22.13b. En el diagrama binario de la Figura 22.13b, los puntos A', B', y C' indican la composición de las fases sólidas que coexisten en equilibrio con los puntos sobre la línea del liquidus L<sub>A</sub>, L<sub>B</sub> y L<sub>C</sub>.

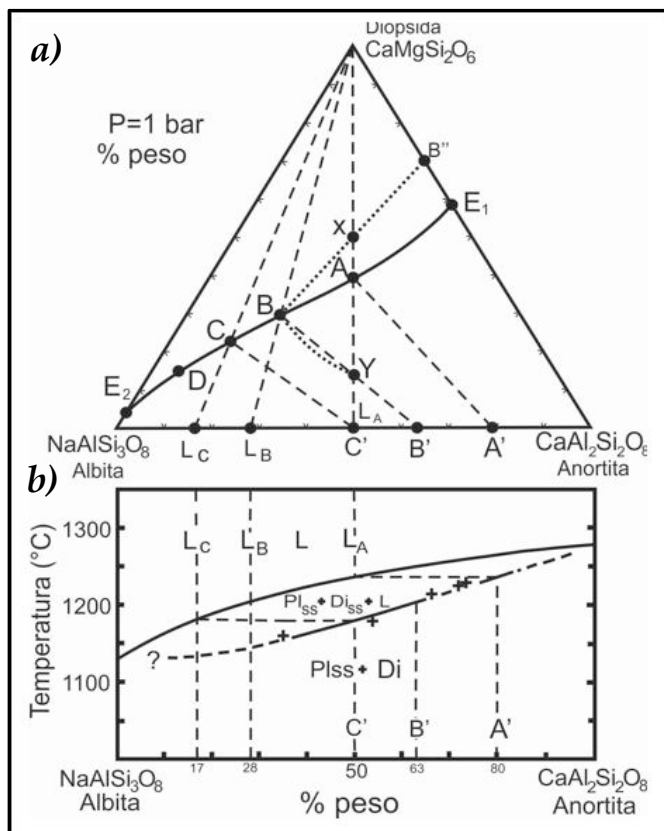


Figura 22.13a Diagrama ternario Di-Ab-An; b) Diagrama binario de las plagioclasas propuesto por Kushiro (1973) en coexistencia con el diópsido.





Si se toma la composición X de la ecuación 22.42 y bajamos la temperatura (verticalmente a la hoja de libro) hasta intercectar la superficie del líquidus, inicia la precipitación de los primeros cristales de diópsido. Al bajar aún más la temperatura, sigue cristalizando diópsido y la composición del líquido varía de acuerdo la línea de puntos X-A, hasta alcanzar el punto A, localizado sobre la línea univariante cotéctica. La temperatura en este punto es cercana a 1235 °C e inicia a cristalizar junto con el diópsido la plagioclasa. la composición de la plagioclasa se obtiene de la misma manrea como se calculó en la Figura 22.5 y resulta que la relación  $An : Ab$  para el punto A' es  $An_{80}$  y  $Ab_{20}$ . La ecuación por lo tanto en el punto A es:

T:1275°C

$$X_A = X_L (0.83 (40 \text{ wt\% Di} + 60 \text{ wt\% An}_{50}) + X_S (100 \text{ wt\% Di}) \dots\dots\dots \text{Ec. 22.45}$$

Sin embargo, en el punto A inician a cristalizar diminutas cantidades de plagioclasa representados en el punto A' con una composición  $An_{80}$ .

Al enfriarse más el sistema llegamos el punto B, en el cual la composición de la plagioclasa en el punto B' es  $An_{63}$ :

T:1200°C

$$X_B = X_L (15 \text{ wt\%Di} + 34 \text{ wt\% An}_{28}) + X_S (35\text{wt\%Di} + 16 \text{ wt\% An}_{63}) \dots\dots\dots \text{Ec. 22.46}$$

El líquido tiene una composición  $An_{28}$  y la cantidad de líquido es de alrededor del 50wt%.

Avanzando con el enfriamiento la composición del líquido cada vez más rico en albíta sigue la línea cotéctica E1-E2 hasta cristalizar completamente en el punto C. Durante este trayecto cotéctico, la plagioclasa cambia de An 80 a An 50 y la última fase líquida presenta una composición  $An_{17}$  (oligoclasa). Si se considera que del punto X al punto A, el líquido sufre un proceso de cristalización fraccionada por asentamiento cristalino del diópsido y posteriormente la "flotabilidad" la plagioclasa, o sea una combinación de la Figura 22.4 y la Figura 22.5 (véase los modelos de la Figura 22.5 a y b), posiblemente una vez cristalizado todo el cuerpo, la composición de la roca presentaría a profundidad de una piroxenita que pasa gradualmente a una norita, luego a un gabro hasta llegar a constituir pequeños cuerpos de diorita en las zonas superiores del cuerpo.

Considerando ahora el punto Y representado en el diagrama ternario Di-Ab-An de la Figura 22.13:

T > 1375°C

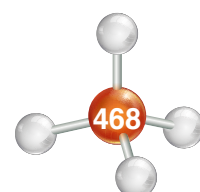
$$X_Y = Y_L (15 \text{ wt\% Di} + 85 \text{ wt\% An}_{50}) \dots\dots\dots \text{Ec. 22.47}$$

Una vez que la temperatura alcanza los 1375°C precipitan los primeros cristales de  $An_{80}$ :

T = 1375°C

$$X_A = X_L(15\text{wt\%Di} + 84.99\text{wt\%An}_{50}) + X_S (0.01\text{wt\%An}_{80})$$

En este punto la temperatura es de alrededor de 1375°C e inicia la cristalización de la plagioclasa de composición bitownítica ( $An_{80}$ ) que coexiste con un liquido de composición de 15 wt% de diópsido 85 wt% de  $An_{50}$ . Si se considera que el líquido presenta una densidad de 2.76 g/cm<sup>3</sup>, la densidad de la labradorita es muy cercana al del líquido de 2.8 g/cm<sup>3</sup>, de tal manera que es difícil que proceda un mecanismo de asentamiento cristalino o de flotación. Sin embargo, conforme va cristalizando la labradorita, el líquido residual aumenta de densidad debido a que la proporción de diópsido en el liquido aumenta en relación a la disminución de la densidad por el enriquecimiento de la componente albítica en el líquido y los cristales de  $An_{80}$  del sólido. El







enriquecimiento de la componente de albíta y diopsído en el líquido propicia que la línea entre Y y B sea levemente curvada. Al llegar al punto B, inicia la cristalización de diopsído:

$$T = 1200^{\circ}\text{C}$$

$$X_B = X_L(13.5\text{wt\%Di} + 43\text{wt\%An}_{28}) + X_S(42\text{wt\%An}_{63} + 1.5\text{wt\%Di})$$

Nótese que los cristales de plagioclasa son más ricos en Ab, como se puede apreciar en la Figura 22.13b. Bajando la temperatura hasta alcanzar el punto C, cristaliza toda el diopsído y la plagioclasa y muestra una composición igual a la del líquido inicial:

$$X_C = X_S(15\text{ wt\% Di} + 85\text{ wt\% An}_{50})$$

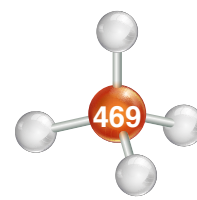
La composición del último líquido (véase punto L<sub>c</sub> de la Figura 22.13b es de composición de oligoclasa (An<sub>17</sub>).

## 22.6 Conclusiones

Los diagramas de fase son la representación gráfica de sistemas de cristalización sintéticos que permiten modelar la historia de cristalización de uno o más minerales en un ambiente natural de cuerpos magmáticos que forman rocas ígneas intrusivas y extrusivas. Su interpretación, de acuerdo con el número de sus componentes, ayuda comprender, describir aspectos relacionados con la Química Inorgánica, además de explicar los siguientes fenómenos:

- La temperatura y presión de equilibrio de las diferentes fases líquidas y sólidas.
- La variación de la composición de las fases: soluciones sólidas, cristalización incongruente, cotéctica, etc.
- La sucesión de cristalización de uno o más minerales o sucesión paragenética.
- Las texturas de equilibrio y desequilibrio de las fases.
- El efecto de la composición, presión y temperatura de las fases fluidas sobre las fases sólidas en un sistema.
- Las implicaciones de la cristalización fraccionada en cuerpos magmáticos.

Además, los diagramas de fase son importantes ya que permiten ratificar y comprender la evolución de cristalización de las diferentes fases que constituyen los cuerpos magmáticos en el espacio y tiempo, ya que explican la formación de minerales de interés científico e industrial que, en algunos casos, son fuente de materia prima de gran interés para la sociedad.





# Referencias Bibliográficas





# Referencias Bibliográficas

## Capítulo 1

- Asimov, I., Cruz, A. & Villena, M. I. (1975). *Breve historia de la química*. Alianza.
- Chang, R. (2010). *Química*. (10ª ed.). México: McGraw-Hill.
- Gómez, J. L. M. (1982). *Química orgánica*. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Huheey, J. E. K., Keiter, E. A., Richard, L. J. E., Keiter, E. A. & Keiter, R. L. (2003). *Química Inorgánica: Principios de estructura y reactividad*. Oxford.
- Hunt, M. J. (1996). *Petroleum Geochemistry and Geology*. (2a ed.). New York: W. H. Freeman and Company. ISBN 0 7167 2441 3.
- Lafuente, S. L., Burguete, M. I. & Altava, B. (1997). *Introducción a la Química Orgánica*. Castello de la Plana: Unversitat Jaume I, ISBN: 84-8021-160-1.
- Rodgers, G. E. (1995). *Química inorgánica: Introducción a la química de coordinación, del estado sólido y descriptiva*. McGraw-Hill Interamericana.
- Weininger S. J. & Stermitz F. R. (1988). *Química orgánica*. Reverté, ISBN: 842917527X.
- Wilkinson, S. (2003). Symmetry rules! *Chemical & Engineering News*, 81(4), pp. 59, ISSN 0009-2347.
- Wojtkowiak, B. & Dhombres, J. (1986). *Historia de la química: de la antigüedad a 1950*. Acribia.
- Wolfgang, W. & Beyer, H. (1987). *Manual de química orgánica*. Reverté.

### Referencias web:

- Descubrimiento de los elementos. consultado en febrero de 2017. ([https://es.wikipedia.org/wiki/Descubrimiento\\_de\\_los\\_elementos\\_que\\_C3%ADmicos](https://es.wikipedia.org/wiki/Descubrimiento_de_los_elementos_que_C3%ADmicos))
- El cobre muestra su poder anticancerígeno. Consultado en mayo de 2017. (<http://www.conacytprensa.mx/index.php/ciencia/salud/366-nota-30-oct-el-cobre-un-elemento-anticancerigeno>).
- Chang, R. (2010). *Química*, 10ma edición McGraw-Hill-México.
- Herradón, G. B. (2011). La química: la ciencia central en el siglo XXI. *Boletín Fundación BBVA*, 26, p 32. Recuperado de: [https://www.fbbva.es/wp.content/uploads/2017/05/dat/boletin\\_fb\\_bva\\_26.pdf](https://www.fbbva.es/wp.content/uploads/2017/05/dat/boletin_fb_bva_26.pdf)

## Capítulo 2

- Brown, T.L., LeMay Jr., H.E., Bursten, B.E., Murphy, C.J. & Woodward, P.M. (2014). *Química la ciencia central*, (12a ed.). México: Pearson Educación.
- Chang, R. (2010). *Química*. (10a ed.). México: Mc Graw Hill.
- Fyfe, W. S. (1981). *Introducción a la Geoquímica*. (1a ed.). Barcelona: Reverté.
- Gutiérrez, A. G. (2002). *Geología estructural y dinámica global*. España: Departamento de Geología, Universidad de Salamanca.
- Instituto Nacional de Geografía y Estadística (1990), Carta Topográfica 1:50,000 "Coatzintla", Clave F14D75, México.
- Instituto Nacional de Geografía y Estadística (1990), Carta Topográfica 1:50,000 "Venustiano Carranza", Clave F14D64, México.
- Kearey, P., Kepleis, K. A. & Vine, F. J. (2008). *Global tectonics*. (3a ed.). Wiley-Blackwell UK.
- Levine, I. N. (2001). *Química cuántica*. (5a ed.). Madrid: Pearson Educación.
- Petrucci, R.H., Herring, F.G., Madura, J.D. & Bissonnette, C. (2011). *Química General*. (10a ed.). Madrid: Pearson Educación.

- Tapia, V. J. (2011). *Estudio aeromagnético en el sureste de México: zona limítrofe Guerrero-Oaxaca*. Tesis de licenciatura. Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México.

## Capítulo 3

- Castro A. S. & Castro B. H. (2007). Propiedades anómalas de transporte de los superconductores de alta TC. *Revista Colombiana de Física*, 39(1).
- Ballesteros-García, Claramunt-Vallespi & Sanz-del Castillo. (2013). *Química orgánica avanzada*. España: UNED - Universidad Nacional de Educación a Distancia.
- Blazquez-Martinez, V. M. (2014). *Ingeniería y Ciencia de los Materiales Metálicos*. Dextra Editorial.
- Brown, Lemay, Bursten, Murphy & Woodward, (2014). *Química, la ciencia central*. (12a ed.). México: Pearson Educación S.A.
- Chang, R. (2010). *Química*. (10a ed.). Ciudad de México: McGraw-Hill/ Interamericana editores, S.A. de C.V.
- Holguín-Quiñones, Estrada-Guerrero & Chávez-Martínez. (2000). *Métodos de separación de los elementos metálicos*. (2a ed.). Ciudad de México: Universidad Autónoma Metropolitana.
- Levine-Ira N. (2001). *Química cuántica*. (8a ed.). Madrid: Pearson Educación S.A.
- Magaña-Solís, L. F. (2012). *Los superconductores*. (4a ed.). vol. 12, Fondo de cultura económica.
- McMurry, J. (2012). *Química orgánica*. (8a ed.). México: Cengage Learning Editores, S.A. de C.V.
- Petrucci, R.H., Herring, F.G., Madura, J.D. & Bissonnette, C. (2011). *Química General*. (10a ed.). Madrid: Pearson Educación.
- Suaste-Gómez, E. (2006). *Cerámicas Piezoeléctricas*. México: Innovación Editorial Lagares de México, S. A. de C. V.
- William, F., Smith, Javad & Hashemi (2006). *Fundamentos, Ciencia, Ingeniería, Materiales*. (4a Ed.). Editorial Mc Graw-Hill.

## Capítulo 4

- Ander, P. & Sonnessa, A. (1998). *Principios de Química, introducción a los conceptos teóricos*. (16a reimpresión). Editorial Limusa Noriega.
- Chang, R. & Goldsby, K. (2014). *Química*. (12a ed.). Mc Graw Hill.
- De Anda, P., Jara, S., Vivas, M., Flores, H. & Rodríguez, M. (2007). *Química 2*. Editorial Umbral.
- Hein, M. & Arena, S. (2016). *Fundamentos de Química*. (14a ed.). México: CENGAGE Learning.
- Klein, C. (2002). *Manual of Mineral Science*. (22a ed.). Gran Bretaña: John Wiley & Sons, Inc.
- Klein, C. & Dutrow, B. (2012). *Mineral Science*. (23a ed.). Gran Bretaña: John Wiley & Sons, Inc.
- Pauling, L. (1960). *Química General*. Madrid: Aguilar Ediciones.
- Whitten, K., Davis, R., Peck, M. & Stanley, G. (2015). *Química*. (10a ed.). CENGAGE Learning.

### Referencias web:

- [http://depa.fquim.unam.mx/amyd/archivero/FuerzasIntermoleculares\\_11310.pdf](http://depa.fquim.unam.mx/amyd/archivero/FuerzasIntermoleculares_11310.pdf)
- [http://depa.fquim.unam.mx/amyd/archivero/Lewis\\_15330.pdf](http://depa.fquim.unam.mx/amyd/archivero/Lewis_15330.pdf)
- [http://recursostic.educacion.es/secundaria/edad/3esofisicaquimica/3quincena3/3q3\\_index.htm](http://recursostic.educacion.es/secundaria/edad/3esofisicaquimica/3quincena3/3q3_index.htm)
- <http://www.ehu.es/biomoleculas/moleculas/fuerzas.htm>
- <http://www.scielo.br/pdf/ciedu/v10n3/18.pdf>
- <http://www.ugr.es/~pittau/FISBIO/t5.pdf>
- [http://www3.uah.es/edejesus/resumenes/QG/Tema\\_4.pdf](http://www3.uah.es/edejesus/resumenes/QG/Tema_4.pdf)



- <https://fyqcastillodeluna.files.wordpress.com/2012/04/trpecv.pdf>
- <https://quimicom.files.wordpress.com/2012/06/polaridad-de-las-molc3a9culas-v2.pdf>
- [www.mundo-mineral.blogspot.mx](http://www.mundo-mineral.blogspot.mx)

## Capítulo 5

- Allen, L.C. (1992). Extension and completion of the periodic table. *Journal of the American Chemical Society*, 114(4), 1510–1511.
- Allen, L.C. & Capitani, J.F. (1994). What is the Metallic Bond? *Journal of the American Chemical Society*, 116(19), 8810–8810.
- Chang, R. & Overby, J. S. (2003). *General chemistry: the essential concepts* (Vol. 3). New York: McGraw-Hill
- Fishbane, P. M., Gasiorowicz, S. G. & Thornton, S. T. (1993). *Physics for scientists and engineers*. (2a ed.). Filadelfia, EUA: Prentice-Hall.
- Girifalco, L. A. (2003). *Statistical mechanics of solids* (Vol. 58). OUP EUA.
- Huheey, J. E., Keiter, E. A., Keiter, R. L. & Medhi, O. K. (2006). *Inorganic chemistry: principles of structure and reactivity*. Pearson Education.
- Jensen, W.B. (1995). A quantitative van Arkel diagram. *Journal of chemical education*, 72(5), 395.
- Lang, P.F. & Smith, B.C. (2015a). An equation to calculate internuclear distances of covalent, ionic and metallic lattices. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17(5), 3355–3369.
- Lang, P.F. & Smith, B.C. (2015b). *Metallic Structure and Bonding*. *World Journal of Chemical Education*, 3(2), 30–35.
- Massa, W. (2013). *Crystal structure determination*. Berlin, Alemania: Springer Science.
- West, A. R. (2007). *Solid state chemistry and its applications*. John Wiley & Sons.

## Capítulo 6

- Ander, P. & Sonnessa, A. J., (1982), *Principios de Química: introducción a los conocimientos básicos* (12a ed). Limusa.
- Baird, C. & Cann, M. (2014). *Química Ambiental* (2a ed). Barcelona: Reverté.
- Brown, T.L., LeMay Jr., H.E., Bursten, B.E., Murphy & Burdge, J.R. (2009). *Química la ciencia central* (11a ed.). México: Pearson Educación.
- Chang, R. (2010). *Química* (10a Ed.). México: Mc Graw Hill.
- Duke, V.A. & Williams, C. D. (2008). *Chemistry for Environmental and Earth Sciences*, New York: CRC press.
- Gill, R. (1944a). *Chemical Fundamentals of geology and environmental geoscience* (3a ed.). Inglaterra: John Wiley & Sons.
- Gill, R. (1944b). *Igneous rocks and processes: a practical guide*. Inglaterra: John Wiley & Sons.
- Petrucci, R.H., Herring, F.G., Madura, J.D. & Bissonnette, C. (2011). *Química General* (10a ed.). Madrid: Pearson Educación.
- Salisbury, E. D. (1982). *Tratado de Mineralogía*, Compañía Editorial Continental.
- Tarbuck, E.J. & Lutgens, F. K. (2005). *Ciencias de la Tierra*. (8a ed). España: Prentice Hall.
- Vernon, R.H. (2008). *A practical guide to rock microstructure*. New York: Cambridge University Press.

## Capítulo 7

- Climent-Olmedo, M. J. & Encinas-Parea, S. (2013). *Química para Ingeniería: Problemas y prácticas*. (2a ed.). Universitat Politècnica de Valencia.
- Segovia-Martínez, M. J. & Montejo-Gómez, M. (2013). *Química fundamental y aplicada a la Ingeniería: problemas resueltos y cuestiones de teoría* (2a ed.). Jaén: Servicio de Publicaciones, Universidad de Jaén.
- Teijón, J., García, J., Jiménez, Y. & Guerrero, I. (2000). *La Química en Problemas* (2a ed.). Alfaomega.

## Capítulo 8

- Ander, P. & Sonnessa, A.J. (1982). *Principios de Química: Introducción a los conocimientos básicos*. (12a ed). Limusa.

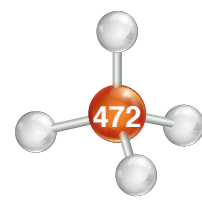
- Benitez, M.A., Garaicochea, F. & Reyes, C. (1979). *Apuntes de fluidos de perforación*. Facultad de Ingeniería: Universidad Nacional Autónoma de México.
- Brown, T.L., LeMay Jr., H.E., Bursten, B.E., Murphy & Burdge, J.R. (2004). *Química la ciencia central*. (9a ed.). México: Pearson Educación.
- Chang, R. (Ed.). (2010), *Química*. (10a Ed.). México: Mc Graw Hill.
- Foulter, R.J. (1994). *Electricidad principios y aplicaciones*. (1a ed). Barcelona: Reverté.
- Hashemi, J. (2006). *Fundamentos de la ciencia e ingeniería de materiales*. (4a ed). México: McGraw-Hill.
- Hein, M. & Arena, S. (2016). *Fundamentos de Química* (14a Ed). México: CENGAGE Learning.
- Petrucci, R.H., Herring, F.G., Madura, J.D. & Bissonnette, C. (2011). *Química General* (10a ed.). Madrid: Pearson Educación.
- Whitten, K.W., Davis, R.E., Peck, M.L. & Stanley, G.G. (2015). *Química* (10a ed). Madrid: CENGAGE Learning.

### Referencias web:

- <http://masguau.com/2010/05/10/mouse-de-cobre-reduce-la-propagacion-de-germenes-patogenos/>
- <http://petroquimex.com/la-galvanizacion-por-inmersion-en-caliente-una-opcion-rentable/>
- <http://www.conacytprensa.mx/index.php/tecnologia/materiales/5529-tecnologia-mexicana-en-el-control-y-prevencion-de-corrosion-de-acero-nota>
- <http://www.glossary.oilfield.slb.com/es.aspx>
- <http://www.inoxcenter.com.mx/productos/general/acero-inoxidable/>
- Pérez-Martínez AL. (2016), *Manual de Química, Tablas, constantes e información general para los cursos de química de la DCB en la Facultad de Ingeniería de la UNAM*. <http://dcb.fi-c.unam.mx/CoordinacionesAcademicas/FisicaQuimica/Quimica/for-mularios/manual%20editado29%20de%20agosto%2017-1.pdf>

## Capítulo 9

- Acuña-Arias, F. (2006). *Química orgánica*. San José, Costa Rica: EUNED.
- Carey, F. A. & Giuliano, R. M. (2014). *Química orgánica* (9a. ed.). México: McGraw-Hill Interamericana.
- Carrasco, M. & Guevara, E. (2001). Efectos ambientales del uso del Metil Terc Butil Éter (MTBE) como oxigenante en la formulación de gasolinas. *Revista INGENIERÍA UC*, 8(1), 1-11.
- García-Becerril, M. de L. (2010). *Química I. Enfoque por competencias*. (2a ed.). México: Mc Graw Hill, pp- 15-22 y 293-304.
- Gómez, J. L. M. (1982). *Química orgánica*. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Gutiérrez, M. E., López, L., Arellano, L. M. & Ochoa, A. (2009). *Química orgánica aprende haciendo...* (1a ed.). México: Pearson Educación, pp- 1-28, 119-162 y 183-199.
- Hunt, M. J. (1996). *Petroleum Geochemistry and Geology*. (2a ed.). New York: W. H. Freeman and Company. ISBN 0 7167 2441 3.
- Klein, D. R. (2013). *Química orgánica*. Editorial Médica Panamericana.
- Lafuente, S. L., Burguete, M. I. & Altava, B. (1997). *Introducción a la Química Orgánica*, Castello de la Plana: Universitat Jaume I, ISBN: 84-8021-160-1.
- Mateos-Gómez, J. L. (1997). *Química Orgánica*. (5a ed.). México: Universidad Nacional Autónoma de México, pp- 1-385.
- McMurry, J. (2008). *Química Orgánica*. (7a ed.). México: Cengage Learning Editores, pp- 10-29, 599-667, 696-700, 751-754 y p16-919.
- Morrison-Thornton, R. & Neilson-Boyd, R. (1998). *Química Orgánica*. (3a ed.). México: Addison Wesley Longman de México S.A. de C.V., pp- 6-30 y 621-999.
- Recio, D. B. (2013). *Química orgánica* (5a ed.). México: McGraw-Hill Interamericana.
- Tissot P.B. & Welte D.H. (1978). *El petróleo su formación y localización*. (1a ed.). México: Conacyt. ISBN 968-823-160-6
- Universidad Tecnológica de México (2000) *Química I*. (2a reimpresión). México: Ediciones Universidad Tecnológica de México S. C., p.371







- Wade, L. G. (2012a). Química Orgánica. Volumen I. (7a ed.). México: Pearson Educación, pp-421-509.
- Wade, L. G. (2012b). Química Orgánica. Volumen II. (7a ed.). México: Pearson Educación, pp-807-979.
- Weininger, S. J. & Stern F. R. (1988). Química orgánica. Editorial Reverté, ISBN: 842917527X.
- Wilkinson, S. (2003). Symmetry rules! Chemical & Engineering News, 81(4), pp. 59, ISSN 0009-2347.
- Wingrove, A. S. & Caret, R. L. (1984). Química orgánica.
- Wojtkowiak, B. & Dhombres, J. (1986). Historia de la química: de la antigüedad a 1950. Acribia.
- Wolfgang, W. & Beyer, H. (1987). Manual de química orgánica. Reverte, Pag. 124
- Yurkanis, B. P. (2007). Fundamentos de Química Orgánica. (1a ed.). México: Pearson Educación, pp- 45-66 y 261-275.

#### Referencias web:

- <http://Ingenieria.de.las.Reacciones.Quimicas.by.vart.pdf>
- <http://depa.fquim.unam.mx/QI/contenido/per8.htm>
- <http://profesionseg.blogspot.mx/2007/12/usos-de-las-amidas.html>
- [http://sgpwe.izt.uam.mx/files/users/uami/pmgalo/06\\_Grupos\\_funciones.pdf](http://sgpwe.izt.uam.mx/files/users/uami/pmgalo/06_Grupos_funciones.pdf)
- <http://solventesindustrialesuni.blogspot.mx/>
- [http://www.academia.edu/22442315/qu%C3%8dmica\\_org%C3%81nica\\_250\\_ejercicios\\_resueltos](http://www.academia.edu/22442315/qu%C3%8dmica_org%C3%81nica_250_ejercicios_resueltos)
- [http://www.findeen.de/metoxietano\\_aplicaciones.html](http://www.findeen.de/metoxietano_aplicaciones.html)
- <https://www.eii.uva.es/organica/qoi/tema-12.php>

## Capítulo 10

- Craft, B., Hawkins, M. & Terry, R. (2014). Applied petroleum reservoir engineering. (3a ed.). Massachusetts: Pearson.
- Cronquist, C. (1973). Dimensionless PVT Behavior of Gulf Coast Reservoir Oils. Journal Of Petroleum Technology, 25(05), 538-542. doi:10.2118/4100-pa
- Danesh, A. (1998). PVT and phase behaviour of petroleum reservoir fluids. Amsterdam: Elsevier.
- Gallardo-Ferrera, H., León-García, A. & Samaniego-Verduzco, F. (2013). Método para elaborar una envolvente de fases para mezclas multicomponente optimizando la solución en la cercanía del punto crítico. Ingeniería Petrolera, 53(11), 667-682.
- McCain, W. (1990). The properties of petroleum fluids (2a ed.). Tulsa: PennWell.
- Michelsen, M. (1980). Calculation of phase envelopes and critical points for multicomponent mixtures. Fluid Phase Equilibria, 4(1-2), 1-10. doi:10.1016/0378-3812(80)80001-x
- Pitzer, K. (1995). Thermodynamics. (1a ed.). New York: MacGraw-Hill.
- Shapiro, A. (1987). The dynamics and thermodynamics of compressible fluid flow. (2a ed.). Malabar, Fla.: R.E. Krieger.
- Whitson, C. & Brulé, M. (2000). Phase behavior. (1a ed.). Richardson, Tex.: Henry L. Doherty Memorial Fund of AIME, Society of Petroleum Engineers.
- Ziervogel, R. & Poling, B. (1983). A simple method for constructing phase envelopes for multicomponent mixtures. Fluid Phase Equilibria, 11(2), 127-135. doi:10.1016/0378-3812(83)80053-3

## Capítulo 11

- Benítez-Hernández, M. A. & Garaicochea-Petirena, F. (1985). Apuntes de terminación de pozos. México: Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México.
- Benítez-Hernández, M. A., Garaicochea-Petirena, F. & Reyes-Alvárez, C. (1979). Apuntes de Fluidos de Perforación. (1a ed.). México: Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México.
- Camilleri, D. et al. (1987). Description of an Improved Compositional Micellar/Polymer Simulator. Society of Petroleum Engineers. doi:10.2118/13967-PA.
- Chayres-Varela, A. I. (2017). Diseño de fracturamiento hidráulico para yacimientos de gas y aceite en lutitas de México. Tesis de Licenciatura. Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México, 128 p.

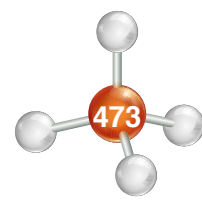
- García-Hernández, Y. (2014). Aplicación de los Fluidos de Control en Perforación de Pozos Petroleros. Veracruz, México.
- Gray, R. G. & Darley, H. (1980). Composition and Properties of Oil Well Drilling Fluids. (4a ed.). USA: Gulf publishing.
- Gregory, K.B., Vidic, R.D. & Dzombak, D.A. (2011). Water management challenges associated with the production of shale gas by hydraulic fracturing. Elements, 7(3), pp. 181-186.
- Khanna, A., Keshavarz, A., Mobbs, K., Davis, M. & Bedrikovetsky, P. (2013). Stimulation of the natural fracture system by graded proppant injection. Journal of Petroleum Science and Engineering, 111, pp. 71-77.
- Knight, W. E. (1898). Description of Bentonite, a new variety of clay. Engineering and Mining Journal, 66, 491.
- León L. J. G. (1993). Optimización de la perforación, factores que afectan la velocidad de perforación. México: Colegio de Ingenieros Petroleros de México A.C.
- McCray, A. & Cole, F. (2011). Tecnología de la Perforación de Pozos Petroleros. (3a ed.). USA.
- Pangliinan, K.D., Christopher, A., de LeonRigoberto, C. & Advincula, C. (2016). Polymers for proppants used in hydraulic fracturing. Journal of Petroleum Science and Engineering, 145, pp. 154-160.
- Rivera-Rodríguez, A. S. (2017). Aplicaciones de la Química a la Ingeniería en Ciencias de la Tierra. Tesis de Licenciatura. Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México.
- Rubi-Villegas, R. (2017). La Química de los lodos de perforación ejemplos y aplicaciones en Ciencias de la Tierra. Tesis de Licenciatura. Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México.
- Soliman, M.Y., Daal, J. & East, L. (2012). Fracturing unconventional formations to enhance productivity. Journal of Petroleum Science and Engineering, 8, pp. 52-67.
- Vega-Farfan, J. L., Verdeja-González, L., Sancho-Martínez, J. & García-Iglesias, J. (1993). Caracterización y propiedades de las bentonitas de Amotape (Región Grau-Perú). Boletín de la Sociedad Española de Cerámica y Vidrio, 32(6), 377-383.

#### Referencias web:

- Saxby, A. (2016). The global proppants industry. Proppants Investment Forum. Recuperado de <https://roskill.com/news/roskills-new-report-on-north-american-proppants-and-frac-sands/>
- Schlumberger (2017). Oilfield Glossary. Recuperado de [http://www.glossary.oilfield.slb.com/es/Terms/s/smectite\\_clay.aspx](http://www.glossary.oilfield.slb.com/es/Terms/s/smectite_clay.aspx)
- <http://www.fcn.unp.edu.ar/sitio/tecnofarma/wp-content/uploads/2010/04/Emulsiones.pdf>
- [http://bibliotecadigital.ilce.edu.mx/sites/ciencia/volumen3/ciencia3/109/html/sec\\_6.html](http://bibliotecadigital.ilce.edu.mx/sites/ciencia/volumen3/ciencia3/109/html/sec_6.html)
- [www.indianz.com/News/2014/014717.asp](http://www.indianz.com/News/2014/014717.asp)

## Capítulo 12

- Addadi, L. & Weiner, S. (2001). Control and design principles in biological mineralization. (Vol 31). Angew. chem. Int. pp. 153-169
- Caballero, M. M., Kursevich, G. & Velasco-de León, M. P. (2009). Tertiary diatom species from a new diatom species from Neogene deposits in central Mexico. Diatom research, 24(1), 23-33
- Cote, G. G. (2009). Diversity and distribution of diatoms producing calcium oxalate crystals in Dieffenbachia seguine (Araceae). Am. J. Bot. 96, 1245-1254
- Cuif, J. P., Dauphin, Y. & Sorauf, J. E. (2011). Diversity of structural patterns and growth modes in skeletal Ca-carbonate of some plants and animals in Biominerals and Fossils Through Time pp. 185-276
- Dauphin, Y. (2002). Structures, organo-mineral compositions and diagenetic changes in biominerals, Current Opinion in Colloid & Interface Science, 7(1-2), pp. 133-138
- Erez, J. (2003). The Source of Ions for Biomineralization in Foraminifera and Their Implications for Paleoclimatographic Proxies. Mineralogical Society of America, 54(1), pp. 115-149
- Franceschi, V.R. & Schueren, A.M. (1986). Incorporation of strontium into plant calcium oxalate crystals. Protoplasma pp. 130, 199-205



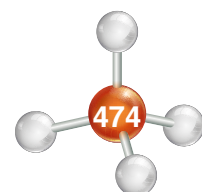




- Hamm, C.E. et al. (2003). Architecture and material properties of diatom shells provide effective mechanical protection. *Nature* pp.421, 841–843
- Hazen, R. M., Grew, E. S., Downs, R. T., Golden, J. & Hystad, G. (2015). Mineral ecology: Chance and necessity in the mineral diversity of terrestrial planets. *Canadian Mineralogist*, 53(2), 295–324
- Knoll, A. H. (2003). Biomineralization and Evolutionary History. *Reviews in Mineralogy and Geochemistry*, 54(1), 329–356.
- Knoll, A. H., Canfield, D. E. & Konhauser, K. O. (2012). *Fundamentals of Geobiology*. Wiley-Blackwell, ISBN: 978-1-4051-8752-7
- Konhauser, K. (2007). *Introduction to Geomicrobiology*. USA: Blackwell Publishing.
- Krasko, A. et al. (2000). Expression of silicatein and collagen genes in the marine sponge *Suberites domuncula* is controlled by silicate and myotrophin. *Eur J. Biochem* 267:4878–4887
- Krejci, M. R. et al. (2011). Selectivity in biomineralization of barium and strontium. *J. Struct. Biol.* pp.176, 192–202
- Monje, P. V. & Baran, E. J. (2005). Evidence of formation of glushinskite as a biomineral in a *Cactaceae* species. *Phytochemistry* pp. 66, 611–614
- Moore, T.S. et al. (2012) Detection of coccolithophore blooms in ocean color satellite imagery: a generalized approach for use with multiple sensors. *Remote Sens. Environ.* pp. 117, 249–263
- Paul C. R. C. (1979a). Early echinoderm radiation. In the *Origin of Major Invertebrate Groups*. Systematics Association, Special Publication 21. New York: Academic Press, pp. 72–88.
- Paul, C. R. C. (1988b). The phylogeny of the cystoids in *Echinoderm Phylogeny and Evolutionary Biology*. Oxford: Clarendon Press, pp. 199–213.
- Perez-Cuadra, V. & Hermann, P. (2013). Characterization and macropattern of calcium oxalate phytoliths in Argentinean endemic species of *Chenopodioidae* (Amaranthaceae). *Quatern. Int.* pp. 287, 83–88
- Raup, D. (1962). The phylogeny of calcite crystallography in echinoids. *J. Paleont* 36:793810.
- Rohling, E. J. & Cooke, S. (1999). Stable oxygen and carbon isotope ratios in foraminiferal carbonate. En *Modern foraminifera*. Dordrecht, The Netherlands: Kluwer Academic.
- Watabe, N. & Kingsley, R. J. (1989). Extra-, inter-, and intracellular mineralization in invertebrates and algae. En *Origin, Evolution, and Modern Aspects of Biomineralization in Plants and Animals* (pp. 209). New York: Plenum.
- Weiner, S. & Dove, P. M. (2003). An overview of biomineralization processes and the problem of the vital effect. In *Biomineralization* (pp 1–29).
- Westbroek, P. & Marin, F. (1998). A marriage of bone and nacre. *Nature* 392:861–862
- Williams, A., Luter, C. & Cusack, M. (2001). The nature of siliceous mosaics forming the first shell of the brachiopod *Discinisca*. *J Structur Biol* 134:25–34
- Zhuravlev, A. Y. & Wood, R. (2008). Eve of biomineralization: Controls on skeletal mineralogy. *Geology*, 36(2), 923–926.
- acuíferos con agua residual tratada, Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. CONAGUA.
- Comisión Nacional del Agua (2007), Norma Oficial Mexicana NOM-015-COAGUA-2007, Infiltración artificial de agua a los acuíferos.- características y especificaciones de las obras y del agua, Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. CONAGUA.
- Dillon, P. J. (2002a). Management of aquifer recharge for sustainability. In: *Proceedings of 4th International Symposium on Artificial Recharge*. Balkema Publishers, AA.
- Dillon, P. J. (2005b). Future management of aquifer recharge. *Hydrogeol J* 13:313–316. doi: 10.1007/s10040-004-0413-6
- Goode, D. J., Senior, L. A., Subah, A. & Jaber, A. (2013). Groundwater-level trends and forecasts, and salinity trends, in the Azraq, Dead Sea, Hammad, Jordan Side Valleys, Yarmouk, and Zarqa groundwater basins, Jordan. *US Geol Surv Open File Rep* 2013-1061
- Halim, C. E., Short, S.A., Scott, J.A., Amal, R. & Low, G. (2005) Modelling the leaching of Pb, Cd, As, and Cr from cementitious waste using PHREEQC. *J Hazard Mater* 125:45–61. doi: 10.1016/j.jhazmat.2005.05.046
- Hernández-Espriú, A. & Domínguez-Mariani, E. (2013). Nitrate mass balance in agricultural areas of intensive fertilizer application: the North Maresme aquifer system case study (Spain). *Boletín de la Sociedad Geológica Mexicana*, 65(1).
- Hernández-Espriú, A. et al. (2014) The DRASTIC-Sg model: an extension to the DRASTIC approach for mapping groundwater vulnerability in aquifers subject to differential land subsidence, with application to Mexico City. *Hydrogeol Journal*, 22(6), pp.1469–1485. <https://doi.org/10.1007/s10040-014-1130-4>
- Huizar-Alvarez, R., Carrillo-Rivera, J. J., Angeles-Serrano, G., Hergt, T. & Cardona, A. (2004). Chemical response to groundwater extraction southeast of Mexico City. *Hydrogeol Journal*. doi: 10.1007/s10040-004-0343-3
- Holzbecher, E. (2008) *Environmental Modeling using MATLAB*, Springer, Alemania
- Idelovitch, E., Ickson-Tal, N., Avraham, O. & Michail, M. (2003) The long-term performance of soil aquifer treatment (SAT) for effluent reuse. *Water Sci Technol Water Supply* 3:239–246.
- Lecomte, K. L., Pasquini, A. I. & Depetris, P. J. (2005). Mineral weathering in a Semiarid Mountain River: Its assessment through Phreeqc inverse modeling. *Aquat Geochemistry* 11:173–194. doi: 10.1007/s10498-004-3523-9
- Maréchal, J. C. et al. (2014) Structure and hydrogeochemical functioning of a sparkling natural mineral water system determined using a multidisciplinary approach: a case study from southern France. *Hydrogeol Journal* 22:47–68. doi: 10.1007/s10040-013-1073-1
- Martínez-Alfaro, P. E., Martínez-Santos, P. & Castaño-Castaño, S. (2006) *Fundamentos de Hidrogeología*. España: Ediciones Mundi-Prensa.
- Merkel, B. J. & Planer-Friedrich. (2008). *Groundwater Geochemistry. A practical guide to modeling of natural and contaminated aquatic systems*. (2a ed.). Alemania: Springer.
- Palma, A., González, F. & Cruickshank, C. (2014) *Managed Aquifer Recharge As a Key Element in Sonora River Basin Management*, Mexico. *Hydrogeol Journal Eng* 20:1–10. doi: 10.1061/(ASCE)JHE.1943-5584.0001114
- Parkhurst, D. & Appelo, C. A. J. (1999 y 2013). Description of input for PHREEQC Version 3 – A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport and inverse geochemical calculations, USGS, Chapter 43 of Section A, *Groundwater Book 6, Modeling Techniques*
- Pérez-Cruz, G. A. (1988) *Estudio sísmológico de reflexión del subsuelo de la Ciudad de México*. Tesis de Maestría. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Pi, K. et al. (2015) Hydrogeochemistry of co-occurring geogenic arsenic, fluoride and iodine in groundwater at Datong Basin, northern China. *J Hazard Mater* 300:652–661. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jhazmat.2015.07.080>
- Piper, A. M. (1953). *A graphic procedure in the geochemical interpretation of water analyses*: American Geophysical Union Transactions, 25th Annual Meeting, 914–928
- Rafferty, K (1999) *Scaling geothermal heat pump systems*, U.S. Department of Energy, Contract No. DE-FG07-90ID 13040

## Capítulo 13

- Alçiçek, H., Bülbül, A. & Alçiçek, M. C. (2016) Hydrogeochemistry of the thermal waters from the Yenice Geothermal Field (Denizli Basin, Southwestern Anatolia, Turkey). *J Volcanol Geotherm Res* 309:118–138. doi: 10.1016/j.jvolgeores.2015.10.025
- Antoniou, E. A., Van Breukelen, B. M., Putters, B. & Stuyfzand, P. J. (2012). Hydrogeochemical patterns, processes and mass transfers during aquifer storage and recovery (ASR) in an anoxic sandy aquifer. *Appl Geochemistry* 27:2435–2452. doi: 10.1016/j.apgeochem.2012.09.006
- Carol, E., García, L. & Borzi, G. (2015). Hydrogeochemistry and sustainability of freshwater lenses in the Samborombón Bay wetland, Argentina. *J South Am Earth Sci* 60:21–30. doi: 10.1016/j.jsames.2015.03.002
- Carrier Air Conditioning Company (1965) *Handbook of Air Conditioning System Design*. New York: McGraw-Hill Books.
- Comisión Nacional del Agua (2003). Norma Oficial Mexicana NOM-014-COAGUA-2003, Requisitos para la recarga artificial de

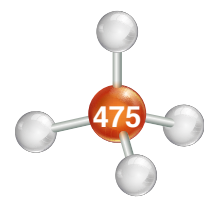




- Rafighdoust, Y. et al. (2015). Isotopic analysis, hydrogeochemistry and geothermometry of Tang-Bijar oilfield springs, Zagros region, Iran. *Geothermics* 55:24–30. doi: 10.1016/j.geothermics.2015.01.001
- Redwan, M. & Abdel-Moneim, A. A. (2016). Factors controlling groundwater hydrogeochemistry in the area west of Tahta, Sohag, Upper Egypt. *J African Earth Sci* 118:328–338. doi: 10.1016/j.jafrearsci.2015.10.002
- Sanford, W. (2011). Calibration of models using groundwater age. *Hydrogeol Journal* 19:13–16. doi: 10.1007/s10040-010-0637-6
- Santoyo, E., Ovando, E., Mooser, F. & León, E. (2005). Síntesis Geotécnica de la Cuenca del Valle de México. México: TGC Geotecnia.
- Schmidt, S., Geyer, T., Marei, A., Guttman, J. & Sauter, M. (2013). Quantification of long-term wastewater impacts on karst groundwater resources in a semi-arid environment by chloride mass balance methods. *J Hydrol* 502:177–190. doi: 10.1016/j.jhydrol.2013.08.009
- Secretaría de Salud (1994). Norma Oficial Mexicana NOM-127-SSA1-1994, Salud ambiental, agua para uso y consumo. Límites permisibles de calidad y tratamientos a que debe someterse el agua para su potabilización, Secretaría de Salud.
- SKM & CSIRO (2012) Progress in managed aquifer recharge in Australia, National Water Commission, Waterlines Report No. 73.
- Stiff, H. A. (1951). The interpretation of chemical water analysis by means of patterns. *J of Petr Tech*, 3, 15-17
- Tiruta-Barna, L. (2008). Using PHREEQC for modelling and simulation of dynamic leaching tests and scenarios. *J Hazard Mater* 157:525–533. doi: 10.1016/j.jhazmat.2008.01.028
- Ünsal, N. & Afşin, M. (1999). Hydrochemical and isotopic properties of the Mahmutlu and Bağdatoğlu mineralized thermal springs, Kırşehir, Turkey. *Hydrogeol Journal* 7:540–545. doi: 10.1007/s100400050227
- Vanderzalm, J. L., Page, D. W., Barry, K. E. & Dillon, P. J. (2010). A comparison of the geochemical response to different managed aquifer recharge operations for injection of urban stormwater in a carbonate aquifer. *Appl Geochemistry* 25:1350–1360. doi: 10.1016/j.apgeochem.2010.06.005
- Vázquez-Sánchez, E. & Jaimes-Palamera, R. (1989) *Geología de la Cuenca de México*, *Geofis Int*, 28(2), pp.133–189
- Ward, J. & Dillon, P. (2009). Robust design of Managed Aquifer Recharge Policy in Australia, CSIRO Water for a Healthy Country Flagship Report to National Water Commission
- Warner, N. R., Levy, J., Harpp, K. & Farruggia, F. (2008). Drinking water quality in Nepal's Kathmandu Valley: A survey and assessment of selected controlling site characteristics. *Hydrogeol Journal* 16:321–334. doi: 10.1007/s10040-007-0238-1
- Xanke, J. et al. (2015). Impact of managed aquifer recharge on the chemical and isotopic composition of a karst aquifer, Wala reservoir, Jordan. *Hydrogeol Journal* 1027–1040. doi: 10.1007/s10040-015-1233-6
- Yang, Q. et al., (2014). Groundwater hydrogeochemistry in injection experiments simulating CO<sub>2</sub> leakage from geological storage reservoir. *Int J Greenh Gas Control* 26:193–203. doi: 10.1016/j.ijggc.2014.04.025
- Zhao, M., Zeng, C., Liu, Z. & Wang, S. (2010). Effect of different land use/land cover on karst hydrogeochemistry: A paired catchment study of Chenqi and Dengzhanhe, Puding, Guizhou, SW China. *J Hydrol* 388:121–130. doi: 10.1016/j.jhydrol.2010.04.034
- Blowes, D., Ptacek, C., Jambor, J. & Weisener, C. (2004). The geochemistry of acid mine drainage. En: H. Holland y K. Turekian, eds. *Treatise of Geochemistry*. Oxford: Elsevier, pp. 149-204.
- Cravotta, C. & Trahan, M. (1999). Limestone drains to increase pH and remove dissolved metals from acidic mine drainage. *Applied Geochemistry*, 14, pp. 581-606.
- Filipek, L., Hatton, G., Gusek, J. & Tsukamoto, T. (2003). Passive treatment of acid rock drainage (ARD): state of the practice. En: *Tailings and mine waste'03*. Netherlands: Balkeman Publishers, pp. 293-303.
- Gu, X. & Evans, L. (2007). Modelling the adsorption of Cd(II), Cu(II), Ni(II), Pb(II), and Zn(II) onto Fithian illite. *Journal of Colloid and Interface Science*, 307, pp. 317-325.
- Holmström, H. & Öhlander, B. (2001). Layers rich in Fe and Mn oxyhydroxides formed at the tailings-pond water interface, a possible trap for trace metals in flooded mine tailings. *Journal of Geochemical Exploration*, 74, pp. 189-203.
- Johnson, D. & Hallberg, K. (2005). Acid mine drainage remediation options: a review. *Science of the Total Environment*, 338, pp. 3-14.
- Jones, A., Collins, R. & Waite, T. (2011). Mineral species control of aluminium solubility in sulfate-rich acidic waters. *Geochemica et Cosmochimica Acta*, 75, pp. 965-977.
- Labastida, I. et al. (2013). Treatment of mining acidic leachates with indigenous limestone, Zimapán, Mexico. *Journal of Hazardous Materials*, 262, pp. 1187-1195.
- Langmuir, D. (1997). *Aqueous environmental geochemistry*. New Jersey: Prentice Hall.
- Lee, G., Bigham, J. & Faure, G. (2002). Removal of trace metals by coprecipitation with Fe, Al and Mn from natural waters contaminated with acid mine drainage in the Ducktown Mining District, Tennessee. *Applied Geochemistry*, 17, pp. 569-581.
- López, P., Aduvire, O. & Baretino, D. (2002). Tratamientos pasivos de drenajes ácidos de mina: estado actual y perspectivas de futuro. *Boletín Geológico y Minero*, 113(1), pp. 3-21.
- Lottermoser, B. (2007). *Mine wastes. Characterization, treatment and environmental impacts*. (2a ed.). US: Springer.
- Luan, F., Santelli, C., Hansel, C. & Burgos, W. (2012). Defining manganese (II) removal processes in passive coal mine drainage treatment systems through laboratory incubation experiments. *Applied Geochemistry*, 27, pp. 1567-1578.
- Macías, F., Caraballo, M. A., Nieto, J. M., Rötting, T. S. & Ayora, C. (2012). Natural pretreatment and passive remediation of highly polluted acid mine drainage. *Journal of Environmental Management*, 104, pp. 93-100.
- Mayes, W., Potter, H. & Jarvis, A. (2009). Novel approach to zinc removal from circum-neutral mine waters using pelletised recovered hydrous ferric oxide. *Journal of Hazardous Materials*, 162, pp. 512-520.
- Miller, A., Figueroa, L. & Wildeman, T. (2011). Zinc and nickel removal in simulated limestone treatment of mining influenced water. *Applied Geochemistry*, 26, pp. 125-132.
- Nordstrom, D. (1982). The effect of sulfate on aluminium concentrations in natural waters: some stability relations in the system Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SO<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O at 298K. *Geochemica et Cosmochimica Acta*, 46, pp. 681-692.
- Nuttall, C. & Younger, P. (2000). Zinc removal from hard, circum-neutral mine waters using a novel closed-bed limestone reactor. *Water Resources*, 34(4), 1262-1268.
- Reddi, L. & Inyang, H. (2000). *Geoenvironmental engineering, principles and applications*. US: Marcel Dekker Inc.
- Romero, F., Armenta, M. & González-Hernández, G. (2007). Solid-phase control on the mobility of potentially toxic elements in an abandoned lead/zinc mine tailings impoundment, Taxco, Mexico. *Applied Geochemistry*, 22, pp. 109-127.
- Romero, F.M., Núñez, L., Gutiérrez, M.E. Armenta, M.A. & Geniceros, A.E. (2011). Evaluation of the potential of indigenous calcareous shale for neutralization and removal of arsenic and heavy metals from acid mine drainage in the Taxco mining area, Mexico. *Archives of Environmental Contamination and Toxicology*, 60(2), 191-203.
- Sánchez, J., Yusta, I. & Burgos, W. (2016). Geochemistry of dissolved aluminium at low pH: hydrobasaluminite formation and interaction with trace metals, silica and microbial cells under anoxic conditions. *Chemical Geology*, 441, pp. 124-137.

## Capítulo 14

- Acero, P., Ayora, C., Torrentó, C. & Nieto, J. (2006). The behavior of trace elements during schwertmannite precipitation and subsequent transformation into goethite and jarosite. *Geochemica et Cosmochimica Acta*, 70, pp. 4130-4139.
- Alcoela, A. et al. (2012). Heavy metal removal of intermittent acid mine drainage with an open limestone channel. *Minerals Engineering*, 26, pp. 86-98.
- Appelo, C. & Postma, D. (2005). *Geochemistry, groundwater and pollution*. (2a ed.). Amsterdam, Netherlands: A.A. Balkema Publishers.





- Santomartino, S. & Webb, J. (2007). Estimating the longevity of limestone drains in treating acid mine drainage containing high concentrations of iron. *Applied Geochemistry*, 22, 2344-2361.
- Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. (2004). NOM-141-SEMARNAT-2003, que establece los procedimientos para caracterizar los jales, así como las especificaciones y criterios para la caracterización y preparación del sitio, proyecto, construcción, operación y postoperación de presas de jales. *Diario Oficial de la Federación*, 13 septiembre, pp. 1-59.
- Sengupta, M. (1993). *Environmental impacts of mining: monitoring, restoration and control*. US: Lewis Publishers.
- Silva, A., Cruz, F., Lima, R., Teixeira, M. & Leao (2010). Manganese and limestone interactions during mine water treatment. *Journal of Hazardous Materials*, 181, pp. 514-520.
- Simón, M. et al. (2005). Interaction of limestone grains and acidic solutions from the oxidation of pyrite tailings. *Environmental Pollution*, 135, pp. 65-72.
- Spitz, K. & Trudinger, J. (2009). *Mining and the environment, from ore to metal*. Great Britain: CRC Press.
- Turan, G., Elevli, S. & Mesci, B. (2011). Adsorption of copper and zinc ions on illite: Determination of the optimal conditions by the statistical design of experiments. *Applied Clay Science*, 52, pp. 392-399.
- Walkersdorfer, C. (2008). *Water management at abandoned flooded underground mines*. Germany: Springer.
- Younger, P. L., Banwart, S. A. & Hedin, R. S. (2002). *Mine water hydrology, pollution, remediation*. Great Britain: Kluwer Academic Publishers.
- Ziemkiewicz, P., Skousen, J. G., Brant, D. L., Sterner, P.L. & Lovett, R.J. (1997). Acid mine drainage treatment with armored limestone in open limestone channels. *Journal of Environmental Quality*, 26(4), pp. 1017-1024.

## Capítulo 15

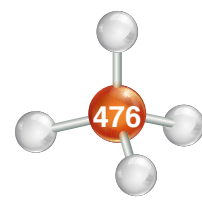
- Comisión Nacional del Agua. (2015.) Actualización de la Disponibilidad Media Anual de Agua en el Acuífero Tecolutla (3002), Estado de Veracruz.
- Gobierno del Estado de Veracruz. (1982). Estudio Geohidrológico de Fuentes de Abastecimiento de Agua Potable Correspondiente a la Localidad de Papantla y Agua Dulce, Municipio de Papantla de Olarte, Ver. Ingenieros Civiles y Geólogos Asociado, S.A.
- Secretaría de Agricultura y Recursos Hidráulicos (1982). Atlas Geohidrológico del Estado de Veracruz. Volumen 1. Banco Nacional de Información Geohidrológica. Secretaría de Agricultura y Recursos Hidráulicos
- Secretaría de Agricultura y Recursos Hidráulicos (1984). Atlas Geohidrológico del Estado de Veracruz. Volumen 2. Compendio de la Exploración del Subsuelo.
- Secretaría de Agricultura y Recursos Hidráulicos (1981). Estudio de Prospección Geohidrológica en la Zona de Tecolutla, Estado de Veracruz. EXYCO, S.A.
- Secretaría de Agricultura y Recursos Hidráulicos, Estudio de las Condiciones Geohidrológicas de la Zona de Papantla, Ver., (Pozo Exploratorio Agua Dulce).

## Capítulo 16

- Amaya-Santiago, L. B. (2010). Apuntes de la Asignatura de Geología de Yacimientos Naturalmente Fracturados. Tesis de Licenciatura. Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México.
- Berumen, S. (1993). *Acidizing Theory and Applications*. School of Petroleum and Geological Engineering. University of Oklahoma, Norman Oklahoma.
- Economides, M. & Nolte, K. (1989). *Reservoir Stimulation*. (2a ed.). Houston, Texas, USA.
- Garaicochea, F. (1985). Apuntes de Estimulación de Pozos. México: Universidad Nacional Autónoma de México.
- Méndez, A. (2014). Ácido fórmico. La Guía de Química [en línea]. [2016, 23 de junio].
- Schlumberger (2008). Yacimientos Carbonatados, pp. 14.

## Capítulo 17

- Aguillón-Robles, A., Aranda-Gómez, J. J. & Solorio-Munguía, J. C. (1994). Geología y tectónica de un conjunto de domos riolíticos del Oligoceno medio en el Sur del estado de San Luis Potosí. *Revista de Ciencias Geológicas*, Instituto de Geología, Universidad Nacional Autónoma de México, 11(1), p. 29-41.
- Best, M. (2003) *Igneous and metamorphic petrology*. (2a ed.). Blackwell Science.
- Best, M. & Christiansen, E. (2001) *Igneous Petrology*. Blackwell Science.
- Campa-Uranga, M. F. & Coney, P. J. (1983). Tectono-stratigraphic terranes and mineral resource distributions of Mexico. *Canadian Journal of Earth Sciences*, 20, p. 1040-1051.
- Centeno-García, E., Ruiz, J., Coney, P. J., Patchett, P. J. & Ortega-Gutiérrez, F. (1993). Guerrero terrane of Mexico: its role in the Southern Cordillera from new geochemical data. *Geology*, 21(5), p. 419-422.
- Christiansen, E. H., Sheridan, M. F. & Burt, D. M. (1900). The geology and geochemistry of Cenozoic topaz riolites from the Western United States. *Geological Society of America Special Paper* 205.
- Elías-Herrera, M. (1989). Geología metamórfica del área de San Lucas del Maíz, Estado de México. *Boletín del Instituto de Geología de la Universidad Nacional Autónoma de México*, 105, p. 79.
- Gómez-Tuena, A., Orozco-Esquivel, M. T. & Ferrari, L. (2005). Temas Selectos de Geología mexicana: Petrogénesis de la Faja Volcánica Transmexicana. *Boletín de la Sociedad Geológica Mexicana*, Conmemorativo del Centenario (3), Tomo LVII. p. 227-283.
- Grajales-Nishimura, J. M. (1988). Geology, geochemistry and tectonic implication of the Juchatengo green rock sequence, State of Oaxaca, southern of Mexico. Tesis de Maestría. University of Arizona.
- Instituto de Geografía (2009). Cap. 4.1 Geología, mapa de Atlas Nacional de México. Universidad Nacional Autónoma de México. [en línea].
- Instituto Nacional de Estadística y Geografía (2009). *Provincias Fisiográficas de México*. [en línea].
- Klein, C. & Dutrow, B. (2008) *The 23rd edition of the manual of mineral science* (after James D. Dana). John Wiley and Sons Inc.
- Le maitre, R. W. (editor), Bateman, P. et al. (1989). *A Classification of Igneous Rocks and Glossary of Terms: Recommendations of the International Union of Geological Sciences Sub-commission on the Systematics of Igneous Rocks*. Oxford: Blackwell Scientific Publications.
- Macías, J. L. (2005). Geología e historia eruptiva de algunos de los grandes volcanes activos de México. *Boletín de la Sociedad Geológica Mexicana*, Conmemorativo del Centenario (3), Tomo LVII. p. 227-283.
- McDowell, W. F. & Clabaugh, E. S. (1981). Igneous history of the Sierra Madre Occidental and its relation to the tectonic history of Western Mexico. *Geological Society of America, Spec. paper* (180), p. 113-123.
- Mendoza-Rosales, C., Silva-Romo, Campos-Madriz, (2014) *Libreta de campo*. (5a ed.). Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México.
- Morán-Zenteno D. J. (1985). Geología de la República Mexicana. Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México e Instituto Nacional de Estadística Geografía e Informática.
- Ortega-Gutiérrez, F. (1981a). Metamorphic belts of southern Mexico and their tectonic significance. *Geofísica Internacional*, 20, p. 177 - 202.
- Ortega-Gutiérrez, F. (1981b). La evolución tectónica premisisípica del Sur de México. *Revista del Instituto de Geología Universidad Nacional Autónoma de México*, 5, p. 140-157.
- Ortega-Gutiérrez, F. (1995c). Oaxaquia, A proterozoic microcontinent accreted to North America during late Paleozoic. *Geology*, 23(12), p. 1127-1130.
- Ortega-Gutiérrez, F. et al. (1992). Texto explicativo de la quinta edición de la Carta Geológica de la República Mexicana escala 1 : 2 000 000. Instituto de Geología Universidad Nacional Autónoma de México, Consejo de Recursos Minerales. 74 p.







- Raisz, E. (1959). Landforms of Mexico. Mapa con texto escala 1:3 000 000. Cambridge: Mass.
- Rollinson H. R. (1993). Using geochemical data. evaluation. Presentation. Interpretation. Pearson Education Limited. Longman Group UK Limited.
- Ruiz, J., Kesler, S. E., Jones, L. M. & Sutter, J. F. (1980). Geology and geochemistry of the Las Cuevas, fluorite deposit, San Luis Potosi. Economic Geology, 75, p. 1200-1209.
- Scoffin, T. (1987). Introduction to Carbonate Sediments and Rocks. USA : Chapman and Hall Pub.
- Sedlock, R. L., Ortega-Gutiérrez, F. & Speed, R. (1993). Tectonostratigraphic Terrane and Tectonic Evolution of Mexico. Special paper 278, Geological Society of America, 153p.
- Servicio Geológico Mexicano (2009) Carta Geológica de la República Mexicana, escala 1: 2 000 000 (6a ed.). Servicio Geológico Mexicano. [en línea].
- Spear, F. S. (1993). Metamorphic phase equilibria and pressure – temperature – time paths. Mineralogical Society of America, 6, 799 p.
- Tolson, G. (1990). Structural development and tectonic evolution of the Santa Rosa, area, SW state of Mexico, Mexico. Geological Society of America Abstracts with programs, 23, p. 104.

## Capítulo 18

- Dick, R. A., Fletcher, L. R. & D'Andrea, D. V. (1986). Explosives and Blasting Procedures Manual. US Department of Interior, Bureau of Mines, Information Circular 8925.
- DuPont (1983). Manual para el uso de explosivos. (2a ed.).
- Hartman, H. L. & Mutmansky J. M. (2002). Introductory mining engineering. (2a ed.). New York: J. Wiley.
- Instituto Tecnológico Geominero de España (1994). Manual de perforación y voladura de rocas. Instituto Tecnológico Geominero de España. Madrid: España.
- Nance, D. (2016). Physical geology today. New York: Oxford University Press.
- Tarbuck, E. J., Lutgens, F. K., & Tasa, D. (2005). Ciencias de la Tierra. (8a ed.). Madrid España: Pearson Educación, S. A.

### Referencias web:

- Boart Longyear. "Taladro para roca S250". Recuperado de [http://app.boartlongyear.com/brochures/S250\\_Brochure\\_ES-XL\\_July2012\(AppReady\).pdf](http://app.boartlongyear.com/brochures/S250_Brochure_ES-XL_July2012(AppReady).pdf) tomado de <http://www.boartlongyear.com/drilling-equipment/production/s250/>
- <http://global.britannica.com/science/rock-geology>
- CAT. "Underground-Longwall GH800B". Recuperado de [http://www.cat.com/en\\_US/products/new/equipment/underground-longwall/plows/1000000277.html](http://www.cat.com/en_US/products/new/equipment/underground-longwall/plows/1000000277.html)
- [https://www.maxam.net/es/fundacion/casa\\_explosivo/alfred\\_nobel\\_nitroglicerina\\_dinamita](https://www.maxam.net/es/fundacion/casa_explosivo/alfred_nobel_nitroglicerina_dinamita), Fundación MAXAM - Casa del Explosivo - Alfred Nobel: de la nitroglicerina a la dinamita. Consultado el 26 de julio.
- Real Academia Española (consultado en 2017). Potasa. Del fr. potasse, y este del neerl. potasschen 'cenizas de pote'. 1. f. Quím. Hidróxido potásico sólido, con propiedades deshidratantes y delicue scentes (que absorbe la humedad).
- Real Academia Española (2016, 14 de junio). "Deflagrar". <http://dle.rae.es/?id=C3CSqYG>
- Wikipedia, La enciclopedia libre (2016, 19 de mayo). "Explosivo" <https://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Explosivo&oldid=91165804>.

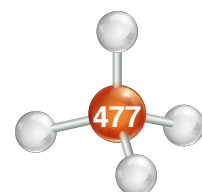
## Capítulo 19

- Del Valle, T. (1984), Apuntes de Introducción a la Geofísica, División de Ingeniería en Ciencias de la Tierra departamento de Geofísica, Universidad Nacional Autónoma de México.
- Estrada, L. (2008). Prospección sísmica. Argentina: Universidad de Tucuman.
- Estrada, L. (2012). Apuntes de prospección geoelectrica. Argentina: Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, Departamento de Geodesia y Topografía, Universidad Nacional de Tucuman.

- Ponce, R. (2004). Empleo de los métodos geofísicos en la prospección urbana. Trabajos de prehistoria, 61(2), pp. 11-23.
- Reynolds, J. (1997) An Introduction to Applied and Environmental Geophysics. Wiley, 806 pp.
- Seigel, H., Nabighian, M., Parasnis, D. S. & Vozoff, K. (2007). The early history of the induced polarization method. The leading edge, 26(3), 312-321
- Zúñiga, F. (2011). Notas introductorias sismología. Centro de Geociencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Campus Juriquilla.
- Referencias web:
  - Greenvia Ingeniería y Consultoría Recuperado de <http://www.greenvia.es/reconocimiento-y-prospeccion-de-minerales-solidos-e-hidrocarbonos-mediante-espectrometria-aerea/>
  - Griem, W. (2016). Apuntes Geología General. Métodos geofísicos – II Recuperado de <http://www.geovirtual2.cl/geologiageneral/ggcap01e.htm>
  - Páginas personales Marianne Hoggan. Recuperado de <http://www.colorado.edu/physics/phys2900/homepages/Marianne.Hogan/waves.html>

## Capítulo 20

- Alvarado, V. & Manrique, E. (2001). Enhanced Oil Recovery. Field Planning and Development Strategies. Kidlington. Oxford: Gulf Professional Publishing/Elsevier.
- Brito-Schulz, M. (2017). Aspectos geológicos de aplicación en técnicas de recuperación mejorada de los Campos de la Sonda de Campeche. Tesis de Licenciatura. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Brown, L. S. & Holme, T. (2011). Chemistry for Engineering Students. Belmont CA: CENGAGE.
- Chiericci, G. L. (1994). Principles of Petroleum Reservoir Engineering Vol. II. Springer Verlag.
- Comisión Nacional de Hidrocarburos, CNH. (2010). Documento técnico. Factores de Recuperación de Aceite y Gas en México. Comisión Nacional de Hidrocarburos.
- Comisión Nacional de Hidrocarburos, CNH. (2012). El Futuro de la Producción de Aceite en México: Recuperación Avanzada y Mejorada IOR-EOR.
- Facultad de Ingeniería., UNAM (1987). Recuperación secundaria y mejorada de hidrocarburos, Foros de consulta permanente del Programa Universitario de Energía.
- Lacerda, E. C. M., Primenko, V. I. & Pires, A. P. (2012). Microbial EOR: A quantitative Prediction of Recovery Factor. SPE 153866; presentado en SPE Improved Oil Recovery Symposium, 14-18 April. Tulsa, Oklahoma, USA: Society of Petroleum Engineers.
- Lake, 1989, L.W. (1989). Enhanced Oil Recovery, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.
- Lake, L. & Walsh, M. P. (2008). Enhanced Oil Recovery Field Data Literature Research. Austin, EUA: Universidad de Texas.
- Littmann, W. (1988). Polymer Flooding: Development in Petroleum Science. Amsterdam: Elsevier Science Publishers B. V.
- Mata-Argandoña, J. J. (2010). Procesos de recuperación mejorada viables a aplicar mediante un criterio de selección jerarquizado. Tesis de pregrado. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Paez-Orozco, P. (2017). El modelo geológico para proyectos de recuperación mejorada en la Cuenca Salina de Istmo. Tesis de Licenciatura. Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Ramírez-Terrones, B. (2017). Consideraciones geológicas para implementar procesos de recuperación mejorada en campos petroleros de la región Chiapas-Tabasco. Tesis de licenciatura. Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Rangel-Germán, E. R. (2012). El Futuro de la Producción de Aceite en México: Recuperación Avanzada y Mejorada IOR-EOR; Comisión Nacional de Hidrocarburos.
- Rangel-Germán, E. R. (2015). IOR-EOR: Una oportunidad histórica para México. Ciudad de México: Academia de Ingeniería.
- Rivera-Sánchez, L. E. (2015). Apuntes de Recuperación Secundaria y Mejorada. Tesis de Pregrado. Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México.





- Salager, J. (2005). Recuperación Mejorada Del Petróleo. Cuadernos FIRP, 35.
- Shutang, G., Qiang, G., Lin J. (2010). Recent progress and evaluation of ASP flooding for EOR in Danqing oil field. SPE 127714; presentado en la Conferencia de EOR en Asia; Muscat, Oman.
- Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ingeniería. (1987). Recuperación secundaria y mejorada de hidrocarburos. Foros de consulta permanente del Programa Universitario de Energía.
- Van Poolen, H. K. and Associates, Inc. (1980), Fundamentals of Enhanced Oil Recovery, PennWell Pub. Co.

#### Referencias web:

- EOGA Oil & Gas (16 de abril de 2017). What is IOR? Recuperado de [http://eoga.net/about\\_ior.php](http://eoga.net/about_ior.php)
- Schlumberger (15 de abril de 2017). Recuperación mejorada. Recuperado de [http://www.glossary.oilfield.slb.com/Terms/e/enhanced\\_oil\\_recovery.aspx](http://www.glossary.oilfield.slb.com/Terms/e/enhanced_oil_recovery.aspx)
- Schlumberger Oilfield Glossary (2017). Recuperación primaria. Recuperado de [http://www.glossary.oilfield.slb.com/es/Terms/p/primary\\_recovery.aspx](http://www.glossary.oilfield.slb.com/es/Terms/p/primary_recovery.aspx)

#### Capítulo 21

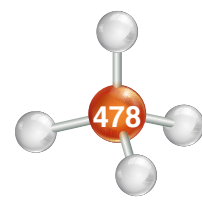
- Cataldi, R. (2006). De la celebración del centenario de la industria geotermoelectrica al desarrollo de la energía geotérmica en Italia en el siglo XXI. *Geotermia*, 19(2), 61-68.
- Davies, J. H. & Davies, D. R. (2010). Earth's surface heat flux. *Solid Earth*, 1, 5-24.
- Fernández, D. P., Energía Geotérmica.
- Hiriart, L. B.G. (2011). Evaluación de la Energía Geotérmica en México. Informe para el Banco Interamericano de Desarrollo y la Comisión Reguladora de Energía.
- Hulen, J. B. & Wright, P. M. (2001). Geothermal Energy: Clean Sustainable Energy for the Benefit of Humanity and the Environment. Energy & Geoscience Institute. University of Utah.
- Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía (IDAE) y el Instituto geológico y Minero de España (IGME) (2008). Manual de Geotermia.
- Ledesma, R. M. (2013a). La geotermia en el futuro energético sustentable de México. Foro Internacional sobre Energía Geotérmica. México: Secretaría de Energía. p 13-22
- Ledesma, R. M. (2013b) El Futuro de la Geotermia en el Siglo XXI. Foro Internacional sobre Energía Geotérmica. México: Secretaría de Energía. p 4-13
- Llopis, T.G. & Rodrigo, A.V. Guía de la Energía Geotérmica. Industria, Energía y Minas. Consejería de Economía y Consumo. Comunidad de Madrid.
- Maya, G. R. & Gutiérrez, N. L. (2017) Recursos Geotérmicos para generar electricidad en México. *Revista Digital Universitaria*, 8(12).

#### Capítulo 22

- Bowen, N. L. (1928). *The Evolution of the Igneous Rocks*. Princeton: Princeton University Press.
- Bowen, N. L. & Tuttle, O. F. (1950). The system NaAlSi<sub>3</sub>O<sub>8</sub> – KAlSi<sub>3</sub>O<sub>8</sub> – H<sub>2</sub>O. *The Journal Geology*, 58(5), 489-511.
- Ehlers, E. G. (1972). *The Interpretation of Geological Phase Diagrams*. New York: Dover Publications, INC.
- Ernest, W. G. (1976). *Petrologic Phase Equilibria*. San Francisco: W. H. Freeman and Company. Pag: 63 – 177.
- Helgeson, H. C. (1964). *Complexing and Hydrothermal Ore Deposition*. New York: Macmillan.
- Kushiro I. (1973). The system diopside-anorthite-albite: Determination of compositions of coexisting phases. *Carnegie Institute Washington. Year book 72* Pag: 502 - 507.
- Levin, E. M., Robbins, C. R. & McMurdie, H. F. (1996) *Phase Diagrams for Ceramists*. The American Ceramic Society, INC. 12 Volúmenes.
- Muan, A. (1979). *Crystallization in Silicate Systems en The evolution of the Igneous Rocks*. Princeton, New Jersey: Princeton University Press. p. 77 – 132.
- Okrusch, M. & Matthes-Siegfried. (2014) *Mineralogie*. (9a ed.). Springer Spektrum.
- Philpotts, A. R. & Ague, J. J. (2009). *Principles of Igneous and Metamorphic Petrology*. (2a ed.). Cambridge: Cambridge University Press. pp: 194 – 242.

#### Bibliografía del apéndice A

- Ander, P. & Sonessa, A. J. (1998). *Principios de Química Introducción a los Conceptos Teóricos*. México: Editorial Limusa.
- Bard, A. J. (1970). *Equilibrio Químico*. México: Ediciones del Castillo S.A.
- Brown, T. L. (2004), *Química La ciencia Central*. México: Pearson Educación.
- Chang, R. (2013). *Química*. México: McGraw-Hill.
- De Lucas, J. (2007). *Orbitales cuanticos*. octubre 2016, de NCSSM 2003 Sitio web: <http://platea.pntic.mec.es/jdelucas/orbitalescuanticos.htm>
- Dean, J. A. (1999). *Lange's handbook of chemistry*. U.S.A.: McGrawHill.
- Langley Research Center. (2006). *Espectro electromagnético*. Octubre 2016, de NASA Sitio web: [http://mynasadata.larc.nasa.gov/images/EM\\_Spectrum3-new.jpg](http://mynasadata.larc.nasa.gov/images/EM_Spectrum3-new.jpg) NASA.
- Pauling, L. (1967). *The Chemical Bond. Journal of Molecular Structure*, 2(4), p. 343
- Mohr, P.J. & Taylor, B.N. (2003). Basic Constants, Units, and Conversion Factors. En D.R. Lide (Ed.), *CRC Handbook of Chemistry and Physics* (pp. 1-54). New York: Editorial Advisory Board.
- Summers, D. B. (1975). *Manual de Química*. (2da ed.). México: Grupo Editorial Iberoamericana.
- Young, H. D. & Freedman, R. A. (2009). *Física Universitaria con Física Moderna volumen 2* (12a ed.). México: Pearson Educación.







RESPUESTAS DE LOS  
CUESTIONARIOS DE  
AUTOEVALUACIÓN











**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del Capítulo 1**

1. a), 2. c), 3. d), 4. b), 5. a), 6. b),  
7. c), 8. d), 9. c), 10. c)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del Capítulo 2**

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 2.2**

1. b) 2. d) 3. c) 4. b) 5. a) 6. c)  
7. a) 8. c) 9. c) 10. d)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 2.3**

1. c) 2. d) 3. a) 4. a) 5. d) 6. b)  
7. d) 8. d) 9. c) 10. a) 11. b) 12. d)  
13. c) 14. a) 15. d)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 2.4**

1. b) 2. d) 3. d) 4. a) 5. d) 6. c)  
7. a) 8. c) 9. a) 10. d) 11. a) 12. d)  
13. b) 14. b) 15. c) 16. a) 17. b) 18. b)  
19. d) 20. b) 21. a) 22. a) 23. b) 24. a)  
25. c) 26. c) 27. c) 28. a) 29. d) 30. a)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del Capítulo 3**

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 3.1**

1. c) 2. b) 3. a) 4. b) 5. d) 6. b)  
7. b) 8. d) 9. a) 10. c)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 3.2**

1. a) 2. c) 3. b) 4. d) 5. a)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 3.3**

1. a) 2. b) 3. a) 4. c) 5. d)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 3.4**

1. d) 2. a) 3. b) 4. c) 5. b) 6. c)  
7. a) 8. a) 9. c) 10. d)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 3.5**

1. b) 2. c) 3.- a) 4. b) 5. b) 6. d)  
7. c) 8. b) 9. c) 10. a)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del Capítulo 4**

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación tema 4.2**

1. c) 2. d) 3. a) 4. b) 5. a) 6. b)  
7. a) 8. b) 9. c) 10. a)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación tema 4.3**

1. a) 2. b) 3. b) 4. c) 5. c) 6. b)  
7. a) 8. c) 9. a) 10. d)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación tema 4.4**

1. a) 2. c) 3. c)

4.

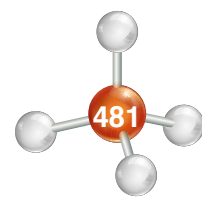
Elemento	Electrones de Valencia	Estructura de Lewis
Litio	1	Li •
Silicio	4	• •Si•
Aluminio	3	• •Al•
Neón	8	•• : Ne : ••
Fósforo	5	•• •P•

5.

Molécula	Estructura de Lewis	Mineral
NaCl	$Na \cdot \cdot \ddot{Cl} :$	Halita
CaF <sub>2</sub>	$:\ddot{F} : \overset{\cdot\cdot}{Ca} : \ddot{F} :$	Fluorita
LiF	$Li \cdot \cdot \ddot{F} :$	Griceita
SiO <sub>2</sub>	$:\ddot{O} - Si - \ddot{O} :$	Cuarzo
SnO <sub>2</sub>	$:\ddot{O} - Sn - \ddot{O} :$	Casiterita

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación tema 4.5**

1. c) 2. b) 3. a) 4. b)





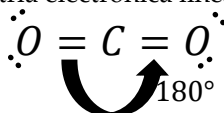
5.

Molécula	Estructura de Lewis	No. de pares enlazantes	No. de pares no enlazantes	No. total, de grupos de e <sup>-</sup> en el átomo central	Geometría electrónica
CH <sub>4</sub>		4	0	4	Tetraédrica
BeCl <sub>2</sub>		2	0	2	Lineal
BF <sub>3</sub>		3	0	3	Trigonal
NH <sub>3</sub>		3	1	4	Tetraédrica
PCl <sub>5</sub>		5	0	5	Bipiramidal trigonal

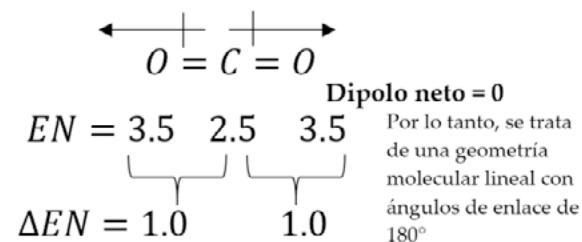
Respuestas al cuestionario de autoevaluación tema 4.6

1. a) 2. a) 3. a) 4. b) 5. b) 6. d)  
7. a) 8. d) 9. a)

10. Se trata de una molécula de la forma AX<sub>2</sub>, es decir: un átomo central (carbono) y dos átomos periféricos (oxígenos). Por lo tanto, se trata de una geometría electrónica lineal.



Conforma a la estructura de Lewis se tiene la presencia de dos dobles enlaces, cada enlace C=O es polar pero la dirección de los dipolos de enlace es opuesta, por lo cual se cancelan, generando que la molécula de CO<sub>2</sub> sea no polar.



Respuestas al cuestionario de autoevaluación tema 4.7

1. b) 2. c) 3. a) 4. c) 5. a) 6. b)  
7. a) 8. b) 9. c) 10. a)

Respuesta a los ejercicios del tema 4.2

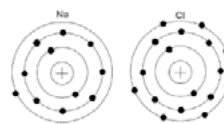
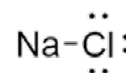
1. Solución:

Compuesto	Polar	No Polar	Iónico
H <sub>2</sub> O	★		
CH <sub>4</sub>		★	
KI			★
CuCl <sub>2</sub>			★
SO <sub>2</sub>	★		

2. Solución:

Na → 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup> 3s<sup>1</sup> = 1

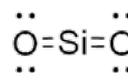
Cl → 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup> 3s<sup>2</sup> 3p<sup>5</sup> = 7



3. Solución:

Si → 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup> 3s<sup>2</sup> 3p<sup>2</sup> = 4 electrones en su capa de valencia

O → 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>4</sup> = 6 electrones en su capa de valencia



4. Solución:

1.- Fluorita

Ca → EN = 1.0

F → EN = 4.0

CaF<sub>2</sub> = 1.0-4.0 = 3.0 Enlace Iónico

2.- Cinabrio

Hg → EN = 2.0

S → EN = 2.6

HgS = 2.0-2.6 = 0.6 Enlace Covalente Polar

3.- Halita

Na → EN = 0.9

Cl → EN = 3.2

NaCl = 0.9-3.2 = 2.3 Enlace Iónico

4.- Pirita

Fe → EN = 1.8

S → EN = 2.6

FeS<sub>2</sub> = 1.8-2.6 = 0.8 Enlace Covalente Polar

5. Solución:

a) Cuarzo (SiO<sub>2</sub>)

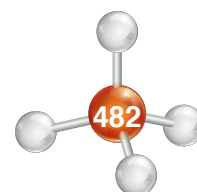
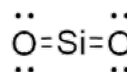
Si → 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup> 3s<sup>2</sup> 3p<sup>2</sup>

En su última capa de valencia hay 4 electrones.

O → 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>4</sup>

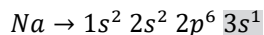
En su última capa de valencia hay 6 electrones.

Al dibujar la estructura de Lewis, tenemos:

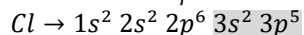




6. Solución:

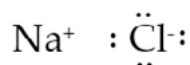


En su última capa de valencia hay 1 electrón.



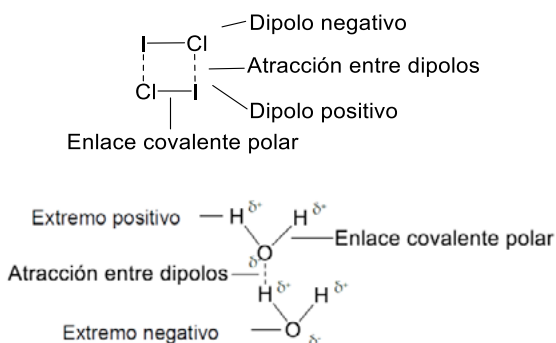
En su última capa de valencia hay 7 electrones.

El átomo de sodio transfiere su electrón de valencia al átomo de Cl, y su estructura de Lewis es:



### Respuestas a los ejercicios del tema 4.3

1. Solución:



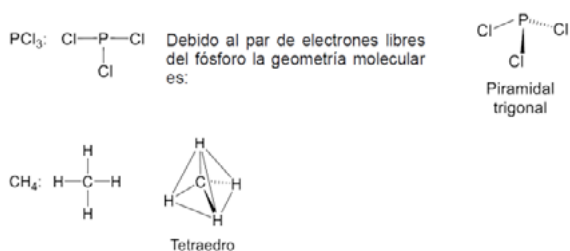
### Respuestas a los ejercicios del tema 4.5

1. Solución:

- Lineal
- Lineal
- Angular
- Triangular plana
- Pirámide trigonal

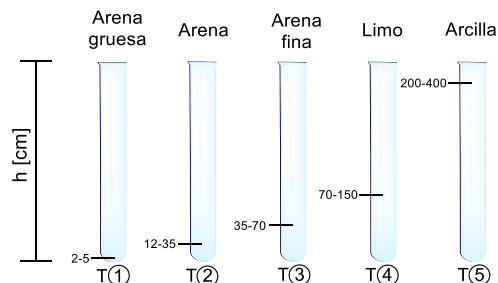
### Respuestas a los ejercicios del tema 4.6

1. Solución:



### Respuestas a los ejercicios del tema 4.7

1. Solución:



### Respuestas a los ejercicios del tema 4.8

1. Solución:

- Disolución diluida
- Disolución sobresaturada
- Disolución diluida
- Disolución diluida

### Respuestas a los ejercicios del tema 4.9

1. Solución:

Mezcla	¿Existe conductividad eléctrica?	Explicación
Agua destilada y azúcar	No	Porque el H <sub>2</sub> O no contiene minerales y el azúcar no forma iones.
Agua de mesa y sal	Sí	El agua tiene minerales disueltos y la sal forma iones.
Agua de mesa y jugo de limón	Ligera	El jugo de limón contiene ácido cítrico, un ácido débil, que genera relativamente pocos iones en agua.
Agua de mesa	Sí	Contiene minerales disueltos.
Agua de mesa y vinagre	Ligera	El vinagre contiene ácido acético, un ácido débil, que genera relativamente pocos iones en agua.

### Respuestas al cuestionario de autoevaluación del Capítulo 5

#### Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 5.2

- c)
- b)
- a)
- c)
- a)
- c)
- b)
- a)
- b)
- b)

#### Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 5.3

- c)
- b)
- a)
- a)
- c)

#### Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 5.4

- b)
- d)
- a)
- c)
- b)

#### Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 5.5

- c)
- b)
- a)
- c)
- d)
- a)
- c)
- c)
- b)
- a)

#### Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 5.6

- a)
- c)
- a)
- a)
- b)
- d)
- d)
- b)
- a)
- d)





**Respuestas a los cuestionarios de autoevaluación del Capítulo 6**

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema "Conceptos de mol y masa molar"**

**1. 119.99 [g/mol]**

FeS <sub>2</sub>	Masa atómica
1 átomo de Fe	55.85 [uma]
2 átomos de S	2 (32.07 [uma]) = <u>64.14</u> [uma]
Suma masas atómicas= masa molar [g/mol]	119.99 [uma] = 119.99 [g/mol]

**2. 292.38 [g/mol]**

ZnS	Masa atómica
1 átomo de Zn	65.39 [uma]
1 átomo de S	32.07 [uma]
Suma masas atómicas= masa molar [g/mol]	97.46 [uma] = 97.46 [g/mol]
1 mol de ZnS pesa 97.46 [g], es decir que 3 moles de ZnS será tres veces este valor. 97.46 X 3 = 292.38 [g]	

**3.**

CaF <sub>2</sub>	Masa atómica
1 átomo de Ca	40.08 [uma]
2 átomo de F	<u>2(19) = 38.00</u> [uma]
Suma masas atómicas= masa molar [g/mol]	79.08 [uma] = 79.08 [g/mol]

En un mol de Fluorita hay 79.08 [g]

$$\text{Moléculas de CaF}_2 = (250 \text{ [g] de CaF}_2) \times \frac{1 \text{ mol (CaF}_2)}{79.08 \text{ [g] de CaF}_2}$$

$$X \frac{6.0221415 \times 10^{23} \text{ moléculas de CaF}_2}{1 \text{ mol (CaF}_2)}$$

$$\text{Moléculas de CaF}_2 = 1.903813 \times 10^{24}$$

**4.**

mol de Fe = 55.85 [g]

$$\text{Átomos de (Fe)} = (25 \text{ [g] Fe}) \left( \frac{6.0221415 \times 10^{23} \text{ átomos de (Fe)}}{55.85 \text{ [g]}} \right)$$

$$\text{Átomos de (Fe)} = 2.696 \times 10^{23}$$

**5.**

metano (CH <sub>4</sub> )	Masa atómica
1 átomo de C	12.01[uma]
4 átomos de H	4 (1.008[uma]) = <u>4.032</u> [uma]
Suma masas atómicas= masa molar [g/mol]	16.042[uma] = 16.042[g/mol]

El metano (CH<sub>4</sub>) tiene una masa molar de 16.04 [g/mol]

La producción es la siguiente

$$\frac{560 \text{ [kg]}}{3 \text{ horas}} = \frac{186.667 \text{ [kg]}}{1 \text{ hora}} = \frac{1866.667 \text{ [kg]}}{10 \text{ horas}}$$

Entonces se tiene una producción diaria total de 1866.667 [kg]

Producción diaria total en gramos= 1866666.67 [g] por día

$$\frac{1 \text{ [kg]}}{1000 \text{ [g]}} = \frac{186.667 \text{ [kg]}}{1866666.67 \text{ [g]}}$$

Si una mol de metano = 16.04 [g]

$$\begin{aligned} \text{Número de moles} &= \frac{\text{Producción diaria total en gramos}}{\text{masa molar en gramos}} \\ &= \frac{1866666.67 \text{ [g]}}{16.04 \text{ [g]}} \end{aligned}$$

Número de moles = 116,375. 7 mol por día

Para calcular la ganancia restaremos el precio del metano por mol menos el costo de la producción de metano por mol.

$$\text{Ganancia} = (\$62.00 - \$20.00) = \$42.00$$

La ganancia que se obtendrá a la semana será:

Ganancia a la Semana= (Producción diaria) (ganancias por mol) (días hábiles a la semana)

$$\text{Ganancia} = (116,375.7 \text{ mol/ día}) (\$42.00) (5 \text{ días})$$

$$\text{Ganancia} = \$24,438,897.00$$

Producción de metano a la semana = Producción diaria x días hábiles a la semana  
Producción de metano a la semana = (1866.667 [kg]/día) X (5días) = 9333.335[kg].

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema "Relaciones estequiométricas: relación en entidades fundamentales, relación molar y relación en masa"**

1. c), 2. d), 3. a), 4. b), 5. d)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema "Reacciones ácido-base y pH"**

1. b), 2. d), 3. a), 4. a), 5. d)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema "Estequiometría"**

1. d), 2. d), 3. d), 4. a), 5. a)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema "Reactivos limitante y en exceso"**

1. F, 2. a), 3. d), 4. a), 5. b)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema "Rendimiento porcentual"**

1. b), 2. V, 3. d), 4. a), 5. d)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema "La fase gaseosa y la ecuación del gas ideal"**

1. a), 2. V, 3. a), 4. b), 5. b), 6. a)

7. d) 8. b) 9. d) 10. a)

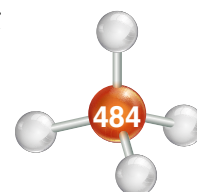
**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema "Unidades de concentración: molaridad, porcentajes masa/masa, masa/volumen y volumen/volumen, fracción molar y partes por millón"**

1. b), 2. b), 3. d), 4. a), 5. c)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del Capítulo 7**

**Problemas de Termoquímica**

1. Verifique si la reacción química está balanceada, si no está balanceada realice el balance.





	2 C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> (g)	+ 10 NO (g)	→	4 CO <sub>2</sub> (g)	+ 2H <sub>2</sub> O (g)	+ 5 N <sub>2</sub> (g)
	2[mol]	10 [mol]		4 [mol]	2 [mol]	5 [mol]
	14 [g]	77 [g]				
ΔH <sub>f</sub> <sup>o</sup> (tablas):	228 $\frac{[kJ]}{[mol]}$	90.25 $\frac{[kJ]}{[mol]}$		-393.51 $\frac{[kJ]}{[mol]}$	241.8 $\frac{[kJ]}{[mol]}$	0 $\frac{[kJ]}{[mol]}$

Transformar los gramos a mol:

$$\frac{14[g]C_2H_2}{26 \left[ \frac{g}{mol} \right]} = 0.5384 [mol]$$

$$\frac{77[g]NO}{30 \left[ \frac{g}{mol} \right]} = 2.5667 [mol]$$

(2.5667 [mol] NO) (2 [mol] C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>/10 [mol]) = 0.5133 [mol] C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> por lo tanto el reactivo limitante es el NO (g)

$$\Delta H_r^o = \left[ 4(mol)\Delta H_{fCO_2}^o + 2(mol)\Delta H_{fH_2O}^o + 5(mol)\Delta H_{fN_2}^o \right] - \left[ 2(mol)\Delta H_{fC_2H_2}^o + 10(mol)\Delta H_{fNO}^o \right]$$

$$\Delta H_r^o = -3074.508 [kJ]$$

a) (2.5667 [mol] NO) (-3074.508 [kJ] / 10 [mol] NO) = -789.12372 [kJ] al 100 [%]

b) (700 [kJ] / 789.12372 [kJ]) X 100 = 88.705988 [%]

2. Solución: ΔH = -802.25 [kJ]

3. Solución: ΔH = -21 219.25 [kJ]

4. Solución: ΔH = +2 027.75 [kJ]

**Problemas de termoquímica con la Ley de Hess**

1. Solución: ΔH = -1300 [kJ]

2. Solución: ΔH = - 2486.3 [kJ]

3. Solución: ΔH = + 155.65 [kJ]

4. Solución: ΔH = + 137 [kJ]

5. Solución: ΔH = - 1375.6 [kJ]

6. Solución: ΔH = +59.26 [kJ]

**Problemas de equilibrio químico**

1. Solución:

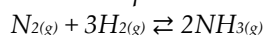
Sustituyendo las concentraciones en el equilibrio en la ecuación correspondiente para el cálculo de K<sub>c</sub>, con los respectivos coeficientes estequiométricos, se obtiene lo siguiente:

$$K_c = \frac{[SO_3]}{[SO_2]^2[O_2]}$$

$$K_c = \frac{8.59 \times 10^{-2}}{(3.07 \times 10^{-2})^2(6.12 \times 10^{-3})} = 14.892 \times 10^3$$

2. Solución:

En primer lugar, se ajusta la ecuación química que representa la reacción en equilibrio:



para escribir la ecuación de K<sub>c</sub> deben ser tomados en cuenta los coeficientes estequiométricos de la ecuación ajustada:

$$K_c = \frac{[NH_3]^2}{[N_2][H_2]^3}$$

Sustituyendo las concentraciones en el equilibrio en la ecuación correspondiente para el cálculo de K<sub>c</sub>, con los respectivos coeficientes estequiométricos, se obtiene lo siguiente:

$$K_c = \frac{(0.102)^2}{(1.03)(1.62)^3} = 2.376 \times 10^{-3}$$

Para calcular K<sub>p</sub> se usa la expresión que relaciona K<sub>p</sub> con K<sub>c</sub>:

$$K_p = K_c(RT)^{\Delta n}$$

donde:

K<sub>p</sub> = Constante de equilibrio en función de las presiones parciales

K<sub>c</sub> = Constante de equilibrio en función de las concentraciones molares

R = Constante de los gases ideales, 0.08205  $\left[ \frac{l atm}{mol K} \right]$

T = Temperatura (K)

Δn = Variación algebraica de los coeficientes estequiométricos de los gases.

$$\Delta n = n_{productos} - n_{reactivos} = 2 - (3 + 1) = -2$$

$$K_p = 2.376 \times 10^{-3} [0.08205 (800.15)]^{-2}$$

$$K_p = 5.51243 \times 10^{-7}$$

3. Solución:

Para calcular las concentraciones de las especies en equilibrio, se plantea el balance de concentraciones molares para la reacción en las condiciones indicadas:

	A (g)	+	3 B (g)	⇌	2 C (g)
Concentración inicial [M]	0.2[M]		0.1[M]		0
Concentración que reaccionó [M]	-x		-3x		+2x
Concentración en el equilibrio [M]	0.2 - x		0.1 - 3x		2x

Cuando se alcanza el equilibrio, se tiene que la concentración molar de la especie B es igual a la concentración molar de la especie C. Esto nos permite calcular el número de moles que reaccionaron, ya que:  
[B] en equilibrio = [C] en equilibrio

$$0.1 - 3x = 2x$$

$$0.1 = 2x + 3x = 5x$$

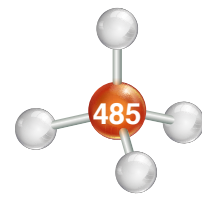
$$x = \frac{0.1}{5} = 0.02 [M]$$

Con el valor de x se puede calcular la concentración de las especies en el equilibrio:

$$[A] = 0.2 - x = 0.18 [M]$$

$$[B] = 0.1 - 3x = 0.04 [M]$$

$$[C] = 2x = 0.04 [M]$$





Con los valores de las concentraciones de las especies A, B y C se calcula  $K_c$ :

$$K_c = \frac{[C]^2}{[A][B]^3} = \frac{(0.04)^2}{(0.18)(0.04)^3} = \frac{1.6 \times 10^{-3}}{1.152 \times 10^{-5}}$$

$$K_c = 138.88$$

Finalmente, a partir del valor de  $K_c$ , y teniendo en cuenta la temperatura (573.15 [K]) y la relación entre  $K_p$  y  $K_c$ , se puede calcular el valor de  $K_p$ :

$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n}$$

$$\Delta n = n_{\text{productos}} - n_{\text{reactivos}} = 2 - (3 + 1) = 2 - 4 = -2$$

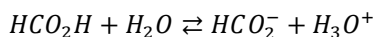
Así, teniendo en cuenta que para esta reacción  $\Delta n = -2$ , se puede escribir:

$$K_p = 138.88 \times \left(0.08205 \left[\frac{\text{l atm}}{\text{mol K}}\right] \times 573.15 [\text{K}]\right)^{-2}$$

Despejando se obtiene:  $K_p = 0.0628$

#### 4. Solución:

La reacción ácido-base que tiene lugar es el equilibrio de disociación o ionización parcial del ácido. Puesto que la constante de acidez es pequeña, se trata de un ácido débil que estará muy poco disociado. El equilibrio de disociación es:



	$\text{HCO}_2\text{H}$	+	$\text{H}_2\text{O}$	$\rightleftharpoons$	$\text{HCO}_2^-$	+	$\text{H}_3\text{O}^+$
Concentración inicial [M]	0.01				0		0
Concentración que reaccionó [M]	-x				+x		+x
Concentración en el equilibrio [M]	0.01 - x				x		x

Se tiene en cuenta la expresión de la constante de disociación del ácido fórmico:

$$K_a = \frac{[\text{HCO}_2^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HCO}_2\text{H}]}$$

$$1.8 \times 10^{-4} = \frac{x \cdot x}{0.01 - x} = \frac{x^2}{0.01 - x}$$

Al resolver la ecuación de segundo grado se obtiene que  $x = 0.0013$  [M]

De esta forma las concentraciones en el equilibrio de las distintas especies son:

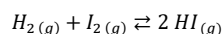
$$[\text{HCO}_2\text{H}] = 0.0087 \text{ [M]}$$

$$[\text{HCO}_2^-] = 0.0013 \text{ [M]}$$

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = 0.0013 \text{ [M]}$$

#### 5. Solución:

Es necesario primero balancear la ecuación:



A continuación, se calculan las concentraciones iniciales de reactivos, considerando un volumen de 5 [L]:

$$[\text{H}_2]_0 = \frac{5.00 \times 10^{-3} \text{ [mol de H}_2\text{]}}{5 \text{ [l]}} = 1 \times 10^{-3} \text{ [M]}$$

$$[\text{I}_2]_0 = \frac{1 \times 10^{-2} \text{ [mol de I}_2\text{]}}{5 \text{ [l]}} = 2 \times 10^{-3} \text{ [M]}$$

Las concentraciones al equilibrio se calculan con base en la siguiente tabla:

	$\text{H}_2(\text{g})$	+	$\text{I}_2(\text{g})$	$\rightleftharpoons$	$2 \text{HI}(\text{g})$
Concentración inicial [M]	$1 \times 10^{-3}$		$2 \times 10^{-3}$		0
Concentración que reaccionó [M]	-x		-x		+2x
Concentración en el equilibrio [M]	$1 \times 10^{-3} - x$		$2 \times 10^{-3} - x$		$1.87 \times 10^{-3}$ = 2x

Se obtiene el valor de x y se calculan las concentraciones de las especies en el equilibrio:

$$x = \frac{1.87 \times 10^{-3} \text{ [M]}}{2} = 9.35 \times 10^{-4} \text{ [M]}$$

$$[\text{H}_2]_{\text{eq}} = 1 \times 10^{-3} - x = 1 \times 10^{-3} \text{ [M]} - 9.35 \times 10^{-4} \text{ [M]} = 6.5 \times 10^{-5} \text{ [M]}$$

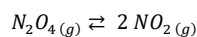
$$[\text{I}_2]_{\text{eq}} = 2 \times 10^{-3} - x = 2 \times 10^{-3} \text{ [M]} - 9.35 \times 10^{-4} \text{ [M]} = 1.065 \times 10^{-3} \text{ [M]}$$

Se procede a calcular el valor de  $K_c$ :

$$K_c = \frac{[\text{HI}]^2}{[\text{H}_2][\text{I}_2]} = \frac{(1.87 \times 10^{-3})^2}{(6.5 \times 10^{-5})(1.065 \times 10^{-3})}$$

$$K_c = 50.515$$

#### 6. Solución:



$$V = 306 \text{ [cm}^3\text{]} = 0.306 \text{ [l]}; \quad T = 308 \text{ [K]}; \quad MM_{\text{NO}_2} = 46 \left[\frac{\text{g}}{\text{mol}}\right];$$

$$MM_{\text{N}_2\text{O}_4} = 92 \left[\frac{\text{g}}{\text{mol}}\right]$$

Calculando los moles y la concentración molar de cada compuesto, se obtiene:

$$n_{\text{NO}_2} = \frac{0.384 \text{ [g]}}{46 \text{ [g/mol]}} = 8.34 \times 10^{-3} \text{ [mol]}$$

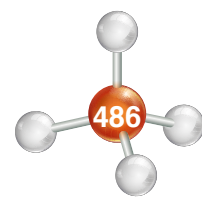
$$n_{\text{N}_2\text{O}_4} = \frac{1.653 \text{ [g]}}{92 \text{ [g/mol]}} = 1.79 \times 10^{-2} \text{ [mol]}$$

$$[\text{NO}_2] = \frac{8.34 \times 10^{-3} \text{ [mol]}}{0.306 \text{ [l]}} = 2.72 \times 10^{-2} \text{ [M]}$$

$$[\text{N}_2\text{O}_4] = \frac{1.79 \times 10^{-2} \text{ [mol]}}{0.306 \text{ [l]}} = 5.85 \times 10^{-2} \text{ [M]}$$

$$K_c = \frac{[\text{NO}_2]^2}{[\text{N}_2\text{O}_4]} = \frac{(2.72 \times 10^{-2} \text{ [M]})^2}{5.85 \times 10^{-2} \text{ [M]}} = 2.72 \times 10^{-2}$$

$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n}$$





$$K_c = K_p \left( \frac{1}{RT} \right)^{\Delta n}; \quad \Delta n = 2 - 1 = 1 [\text{mol}]; \quad K_c$$

$$= \frac{K_p}{(RT)^{\Delta n}}$$

$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n} = 1.26 \times 10^{-2}$$

$$\times (0.08205 [\text{atm l K}^{-1} \text{ mol}^{-1}]$$

$$\times 308 [\text{K}])^1$$

$$K_p = 0.31$$

**Problemas de equilibrio químico con principio de Le Châtelier**

1. Solución:

a) La reacción que tiene lugar es:



Según el principio de Le Châtelier, un incremento de temperatura desplaza el equilibrio hacia la izquierda, pues de derecha a izquierda la reacción es endotérmica.

Como el número de moles es el mismo en ambos miembros de la ecuación, la presión no influye.

b)

	$\text{H}_2$	+	$\text{I}_2$	$\rightleftharpoons$	$2 \text{HI}$
Concentración inicial [M]	7.94		5.30		0
Concentración que reacciona [M]	-x		-x		+2x
Concentración en el equilibrio [M]	7.94 - x		5.30 - x		2x = 9.52

Se obtiene el valor de x y se calculan las concentraciones de las especies en el equilibrio:

$$[\text{HI}] = 9.52 [\text{M}] = 2x$$

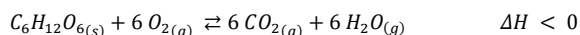
$$x = \frac{9.52 [\text{M}]}{2} = 4.76 [\text{M}]$$

$$[\text{H}_2] = 7.94 [\text{M}] - x = 3.18 [\text{M}]$$

$$[\text{I}_2] = 5.30 [\text{M}] - x = 0.54 [\text{M}]$$

$$K_c = \frac{[\text{HI}]^2}{[\text{H}_2][\text{I}_2]} = \frac{(9.52)^2}{(3.18)(0.54)} = 52.77$$

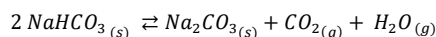
2. Solución:



Aplicando el principio de Le Châtelier en los cuatro casos, resulta:

- Se desplaza hacia la izquierda, para eliminar parte del  $\text{CO}_2$  añadido.
- Como la glucosa es un sólido, el equilibrio no se desplaza.
- Desplazamiento hacia la izquierda, pues en los reactivos hay menor número de moles de gases.
- En el sentido que absorbe calor, se desplaza hacia la izquierda.

3. Solución:



Como el número de moles de  $\text{CO}_2$  es igual al número de moles de  $\text{H}_2\text{O}$ , las presiones parciales en el equilibrio son iguales:

$$P_{\text{CO}_2} = P_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{2.42 [\text{atm}]}{2} = 1.21 [\text{atm}]$$

Al ser un equilibrio heterogéneo, la constante de equilibrio es:

$$K_p = P_{\text{CO}_2} P_{\text{H}_2\text{O}} = 1.21 [\text{atm}] \times 1.21 [\text{atm}] = 1.46$$

$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n}$$

$$K_c = \frac{K_p}{(RT)^{\Delta n}}; \quad \Delta n = 2 - 0 = 2 [\text{mol}]$$

$$K_c = \frac{1.46}{(0.082 [\text{atm l} / \text{K mol}]) \cdot 433 [\text{K}]^2} = 1.158 \times 10^{-3}$$

4. Solución:

a)

	$\text{N}_2\text{O}_4(\text{g})$	$\rightleftharpoons$	$2 \text{NO}_2(\text{g})$
Concentración inicial [M]	$\frac{1.2 [\text{mol}]}{2.6 [\text{l}]} = 0.46 [\text{M}]$		0
Concentración que reacciona [M]	-x		+2x
Concentración en el equilibrio [M]	0.46 [M] - x		2x

$$K_c = \frac{[\text{NO}_2]^2}{[\text{N}_2\text{O}_4]} = \frac{(2x)^2}{0.46 - x} = \frac{4x^2}{0.46 - x} = 4.5 \times 10^{-3}$$

Al resolver la ecuación de segundo grado se obtiene que:  $x = 2.2 \times 10^{-2} [\text{M}]$

$$[\text{NO}_2] = 2x = 4.4 \times 10^{-2} [\text{M}]$$

$$[\text{N}_2\text{O}_4] = 0.46 - x = 0.438 [\text{M}]$$

b) Según el principio de Le Châtelier, al aumentar la presión el equilibrio se desplaza hacia la izquierda (menor número de moles de gases).

c) Si la presión se duplica, el volumen se reduce a la mitad y las concentraciones se duplican.

	$\text{N}_2\text{O}_4(\text{g})$	$\rightleftharpoons$	$2 \text{NO}_2(\text{g})$
c. inicial [M]	$2(0.438) = 0.876 [\text{M}]$		$2(4.4 \times 10^{-2}) = 8.8 \times 10^{-2} [\text{M}]$
c. equilibrio [M]	0.876 + x		$8.8 \times 10^{-2} - 2x$

$$K_c = 4.5 \times 10^{-3} [\text{M}] = \frac{(8.8 \times 10^{-2} - 2x)^2}{0.876 + x}$$

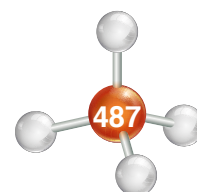
Al resolver la ecuación de segundo grado se obtiene que:  $x = 1.24 \times 10^{-2} [\text{M}]$

$$[\text{NO}_2] = 8.8 \times 10^{-2} - 2 \times 1.24 \times 10^{-2} = 6.3 \times 10^{-2} [\text{M}]$$

$$[\text{N}_2\text{O}_4] = 0.876 + 1.24 \times 10^{-2} = 0.888 [\text{M}]$$

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 7.2**

1. a)    2. c)    3. b)    4. d)    5. c)





**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 7.3**

1. c) 2. a) 3. b) 4. c) 5. d)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 7.4**

1. c) 2. c) 3. b) 4. a) 5. b)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 7.5**

1. d) 2. d) 3. c) 4. a) 5. a)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del Capítulo 8**

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 8.2**

1. c) 2. d) 3. c) 4. b) 5. d)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 8.3**

1. c) 2. c) 3. d) 4. a) 5. a)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 8.4**

1. a) 2. a) 3. d) 4. b) 5. c)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 8.5**

1. a) 2. c) 3. b) 4. b) 5. c)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 8.6**

1. b) 2. b) 3. a) 4. c) 5. a)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del Capítulo 9**

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 9.2**

1. c) 2. c) 3. b) 4. b) 5. c)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 9.3**

1. a) 2. d) 3. d) 4. c) 5. a)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 9.4**

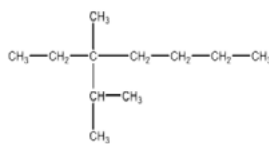
1. a) 2. c) 3. b) 4. d) 5. d) 6. a) 7. d) 8. c) 9. b) 10. d)

**Respuestas al cuestionario de autoevaluación del tema 9.5**

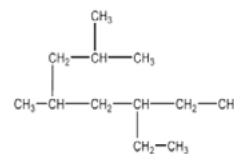
1. d) 2. a) 3. a) 4. d) 5. d) 6. c) 7. a) 8. c) 9. b) 10. d)

**Respuestas Ejercicios de Química Orgánica**

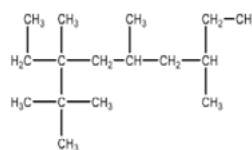
1.



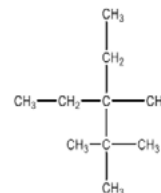
3-etil-2,3dimetilheptano



6-etil-2,4-dimetiloctano

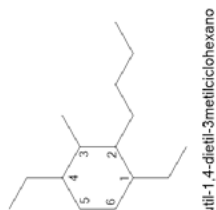


3-etil-2,2,3,5,7-pentametilnonano

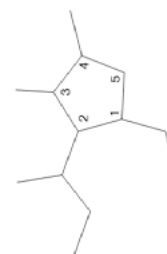


3-etil-2,2,3-trimetilpentano

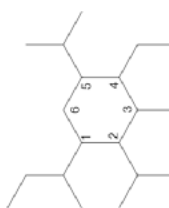
2.



2-butil-1,4-dietil-3metilciclohexano



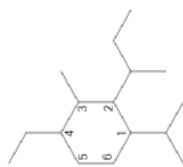
1-etil-2,secbutil-3,4-dimetilciclopentano



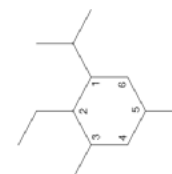
4-etil-2,5-disopropil-1,secbutil-3,metilciclohexano



3-etil-2,3-isopropil-1,secbutil-4,metilciclobutano



4-etil-1-isopropil-2,secbutil-3,metilciclohexano

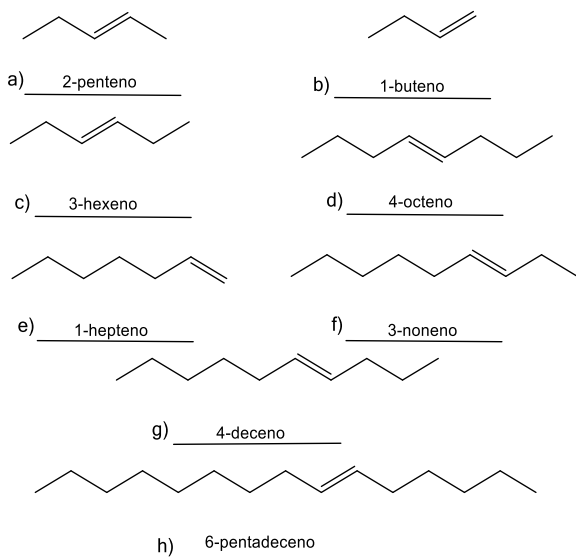


2-etil-1-isopropil-3,5-dimetilciclohexano

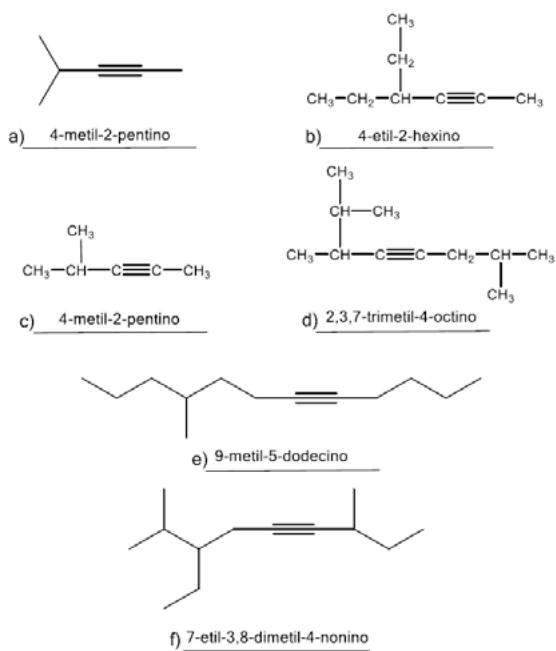




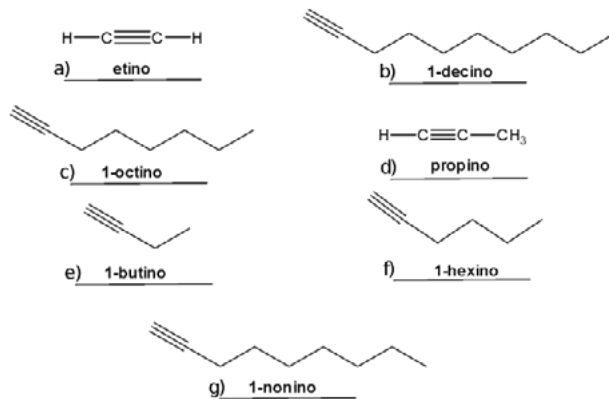
3.



4.



5.



Respuestas al cuestionario de autoevaluación del Capítulo 10

1. a) 2. a) 3. c) 4. b) 5. c) 6. b)  
 7. a) 8. a) 9. c) 10. b) 11. b)  
 12. a) 13. c) 14. c) 15. a)



# APÉNDICE



# Apéndice A

## Manual de tablas para química

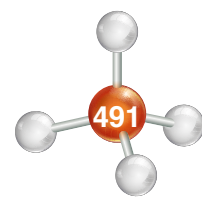
Recopilado, editado y organizado por Ana Laura Pérez Martínez

### Sistema internacional de unidades y equivalencias [2, 12]

Magnitud básica	Unidad básica	Símbolo en SI	Definición
Longitud	metro	M	Distancia que la luz recorre en 1/299 729 458 de un segundo.
Masa	kilogramo	Kg	Masa de un cilindro de aleación de platino-iridio almacenado en París.
Tiempo	segundo	S	Duración de 9 192 631 770 periodos de la radiación correspondiente a la transición entre dos niveles híper finos del átomo cesio-133.
Corriente eléctrica	amperio	A	Magnitud de la corriente que cuando fluye entre dos conductores paralelos de longitud infinita, separados por 1 [m] en el vacío, resulta en una fuerza entre los dos cables de $2 \times 10^{-7}$ Newton por metro de longitud.
Temperatura	temperatura	K	Definido como la fracción 1/273.16 de la temperatura termodinámica del punto triple del agua.
Cantidad de sustancia	mol	Mol	Cantidad de sustancia contenida de entidades específicas igual en magnitud a los átomos contenidos de carbono-12 en exactamente 0.012 [kg] de ese elemento.
Intensidad luminosa	candela	Cd	Intensidad luminosa en una dirección dada, de una fuente que emite radiación monocromática con una frecuencia de $540 \times 10^{12}$ hertz y que tiene una intensidad de radiación en esa dirección de 1/683 watts por estereorradián.

### Factores unitarios de conversión de unidades [2]

Magnitud derivada	Nombre de la unidad derivada o unidades básicas	Símbolo de la unidad derivada	Expresión en función de otras unidades
Área	metro cuadrado	-	m <sup>2</sup>
Volumen	metro cúbico	-	m <sup>3</sup>
Velocidad	metro por segundo	-	m/s
Aceleración	metro por segundo al cuadrado	-	m/s <sup>2</sup>
Cantidad de movimiento	kilogramo por metro por segundo	-	kg m/s
Densidad	kilogramo por metro cubico	-	kg/m <sup>3</sup>
Frecuencia	hercio	Hz	1/s
Fuerza	newton	N	kg m/s <sup>2</sup>
Presión	pascal	Pa	N/m <sup>2</sup> = kg/m s <sup>2</sup>
Potencia	watt	W	J/s = kg m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup>
Energía	joule	J	N m = kg m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>
Carga eléctrica	coulomb	C	A s
Diferencia de potencial eléctrico	voltio	V	W/A = kg m <sup>2</sup> /A s <sup>3</sup>
Capacidad eléctrica	faradio	F	C/V = A <sup>2</sup> s <sup>4</sup> /kg m <sup>2</sup>
Conductancia eléctrica	siemens	S	A/V = A <sup>2</sup> s <sup>3</sup> /kg m <sup>2</sup>
Inducción magnética	tesla	T	N s / m C = kg / A s <sup>2</sup>







## Múltiplos y submúltiplos de las unidades SI [5]

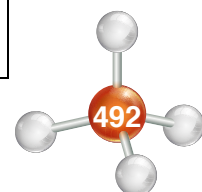
<b>Magnitud derivada</b>
<b>Longitud</b>
1 [m] = 3.28084 [ft] = 39.3701 [in]
1 [in] = 2.54 [cm]
<b>Masa</b>
1 [kg] = 2.20462 [lb]
<b>Energía</b>
1 [kJ] = $10^3$ [m <sup>3</sup> Pa] = $10^4$ [bar cm <sup>3</sup> ] = 9871.67 [atm cm <sup>3</sup> ] = 239.01 [cal] = 0.94845 [BTU]
<b>Presión</b>
1 [bar] = 100 [kPa] = 0.1 [MPa] = 0.986923 [atm] = 14.5038 [psia] = 1.0197 [kgf/cm <sup>2</sup> ] = 750.062 [mmHg] = 401.8 [in H <sub>2</sub> O]
1 [atm] = 101.325 [kPa] = 760 [mmHg] = 0.101325 [MPa]
<b>Potencia</b>
1 [kW] = 1 [KJ/s] = 3414.4 [Btu/h] = 1.341 [HP] = 860.4 [kcal/h] = 737 [lb ft/s]
Constante Universal de Los Gases
R = 8.314 [J/k mol] = 83.14 [bar cm <sup>3</sup> /K mol] = 1.987 [cal/K mol] = 82.06 [atm cm <sup>3</sup> /K mol]
<b>Volumen</b>
1 [m <sup>3</sup> ] = 1000 [l] = 35.3147 [ft <sup>3</sup> ] = 264.17 [gal]

Factor	Nombre	Símbolo	Factor	Nombre	Símbolo
10 <sup>24</sup>	yotta	Y	10 <sup>-1</sup>	deci	d
10 <sup>21</sup>	zetta	Z	10 <sup>-2</sup>	centi	c
10 <sup>18</sup>	exa	E	10 <sup>-3</sup>	mili	m
10 <sup>15</sup>	peta	P	10 <sup>-6</sup>	micro	μ
10 <sup>12</sup>	tera	T	10 <sup>-9</sup>	nano	n
10 <sup>9</sup>	giga	G	10 <sup>-12</sup>	pico	p
10 <sup>6</sup>	mega	M	10 <sup>-15</sup>	femto	f
10 <sup>3</sup>	kilo	k	10 <sup>-18</sup>	atto	a
10 <sup>2</sup>	hecto	h	10 <sup>-21</sup>	zepto	z
10 <sup>1</sup>	deca	da	10 <sup>-24</sup>	yocto	y

## Constantes físicas [2, 4, 7]

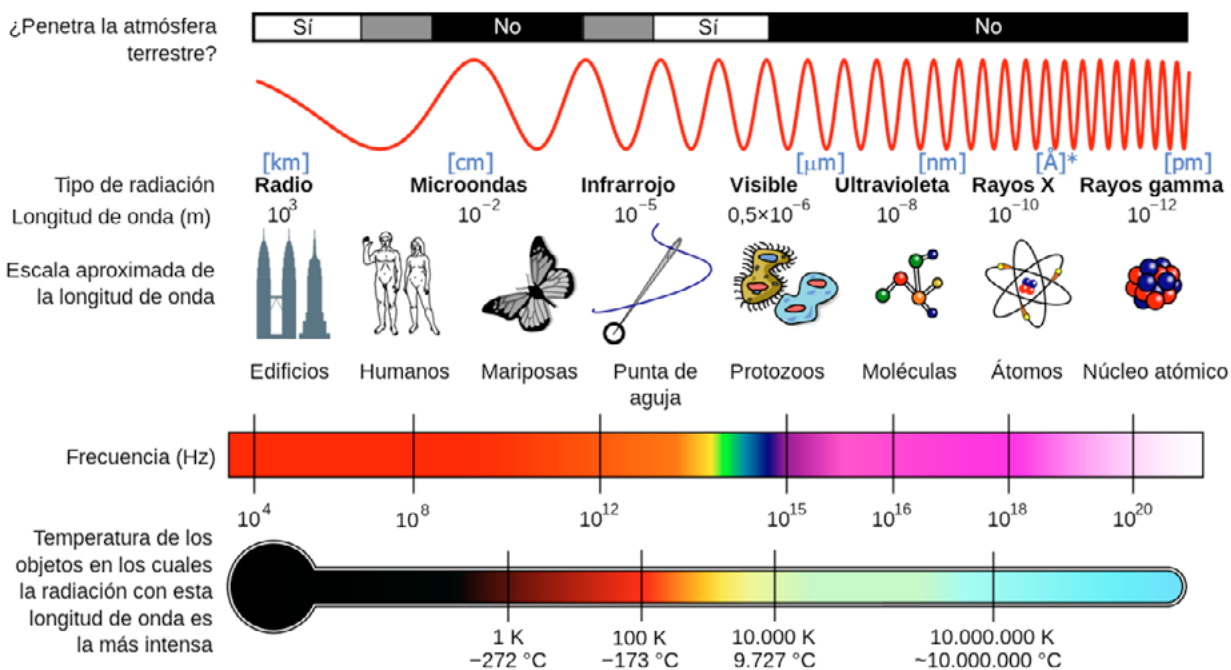
Constante	Símbolo	Magnitud
Aceleración de la gravedad en la tierra	g	9.80665 [m/s <sup>2</sup> ]
Carga eléctrica fundamental	q	1.602176x10 <sup>-19</sup> [C]
Cero absoluto de temperatura		-273.15 °C
Constante de Avogadro	N <sub>A</sub>	6.0221x10 <sup>23</sup> [1/mol]
Constante de Boltzmann	K <sub>B</sub>	1.380650x10 <sup>-23</sup> [J/K]
Constante de Coulomb	K <sub>C</sub>	9x10 <sup>9</sup> [N m <sup>2</sup> /C <sup>2</sup> ]
Constante de Faraday	F	96485.3399 [C/mol]
Constante de gravitación universal	G	6.674x10 <sup>-11</sup> [m <sup>3</sup> /kg s <sup>2</sup> ]
Constante de Planck	h	6.626069x10 <sup>-34</sup> [J s]
Constante de Rydberg	R <sub>H</sub>	10 973 732 [1/m]
Constante universal de los gases ideales	R	8.314472 [J / K mol]

Constante	Símbolo	Magnitud
Densidad del aire a 298.15 [K] y a nivel del mar	ρ <sub>aire</sub>	1.184 [kg/m <sup>3</sup> ]
Electrón volt	eV	1.602176x10 <sup>-19</sup> [J]
Logaritmo base natural	e	2.718281828
Masa del electrón	m <sub>e</sub>	9.109382 x10 <sup>-31</sup> [kg]
Masa del protón	m <sub>p</sub>	1.6726 x 10 <sup>-27</sup> [kg]
Permeabilidad magnética en el vacío	μ <sub>0</sub>	4 π x 10 <sup>-7</sup> [N / A <sup>2</sup> ] = 1.257x10 <sup>-6</sup> [Tm/A]
Pi	π	3.14159265358979
Presión estándar	---	101 325 [Pa]
Primera constante de radiación	2hc <sup>2</sup>	3.74178x10 <sup>-16</sup> [m <sup>2</sup> W]
Radio de Bohr	RB	5.2918 x 10 <sup>-11</sup> [m]
Velocidad de la luz en el vacío	c	299 792 458 [m/s]
Viscosidad dinámica del aire a 298.15 [K] y a nivel del mar	η <sub>aire</sub>	1.849x10 <sup>-5</sup> [kg/m s]





## Espectro electromagnético [8, 9]



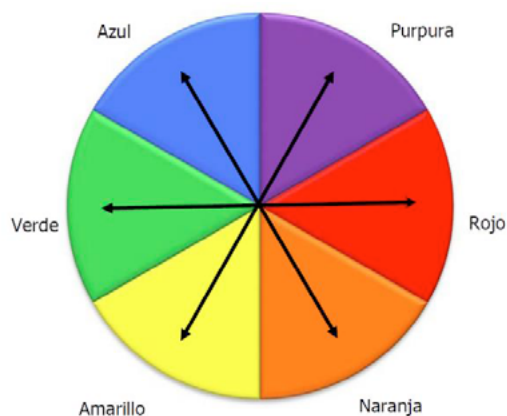
\*Angström, unidad de longitud usada para longitudes de onda, distancias moleculares y atómicas, perteneciente al SI y cuya equivalencia es  $1 \text{ [Å]} = 1 \times 10^{-10} \text{ [m]}$ .

## Longitudes de onda de la luz visible [2]

Intervalo de longitud de onda [nm]	Color
380 a 427	Violeta
427 a 476	Azul
476 a 570	Verde
570 a 581	Amarillo
581 a 618	Anaranjado
618 a 780	Rojo

## Colores complementarios

Las flechas vinculan los colores complementarios





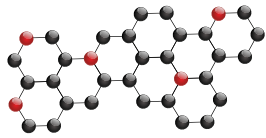


Tabla periodica de los elementos [7, 9]

GRUPO 1		GRUPO 2		GRUPO 3		GRUPO 4		GRUPO 5		GRUPO 6		GRUPO 7		GRUPO 8		GRUPO 9		GRUPO 10		GRUPO 11																							
IA		IIA		IIIB		IVB		VB		VIB		VIIB		VIII		VIII		VIII		IB																							
1	1.00794 <b>H</b> 2.2 Hidrógeno 0.0899 13.5984 -259.14 -252.87 (v) 37 +1,-1	3	6.941 <b>Li</b> 0.98 Litio 0.535 5.3917 180.54 1342 (m) 152 BCC +1	4	9.012182 <b>Be</b> 1.57 Berilio 1.848 9.3227 1287 2470 (m) 112 HCP +2	11	22.9897 <b>Na</b> 0.93 Sodio 0.968 5.1391 97.72 883 (m) 186 BCC +1	12	24.3050 <b>Mg</b> 1.31 Magnesio 1.738 7.6462 650 1090 (m) 160 HCP +2	19	39.0983 <b>K</b> 0.82 Potasio 0.856 4.3407 63.38 759 (m) 227 BCC +1	20	40.078 <b>Ca</b> 1.00 Calcio 1.55 6.1132 842 1484 (m) 197 FCC +2	21	44.9559 <b>Sc</b> 1.36 Escandio 2.985 6.5615 1541 2830 (m) 162 HCP +3	22	47.867 <b>Ti</b> 1.54 Titanio 4.507 6.8281 1668 3287 (m) 147 HCP +2,3,4	23	50.9415 <b>V</b> 1.63 Vanadio 6.11 6.7462 1910 3407 (m) 134 BCC +2,3,4,5	24	51.9961 <b>Cr</b> 1.66 Cromo 7.14 6.7665 1907 2671 (m) 128 BCC +2,3,6	25	54.938049 <b>Mn</b> 1.55 Manganeso 7.47 7.4340 1246 2061 (m) 127 $\zeta$ cubic +2,3,4,6,7	26	55.845 <b>Fe</b> 1.83 Hierro 7.874 7.9024 1538 2861 (m) 126 BCC +2,3	27	58.9332 <b>Co</b> 1.88 Cobalto 8.9 7.8810 1495 2927 (m) 125 HCP +2,3	28	58.6934 <b>Ni</b> 1.91 Niquel 8.908 7.6398 1455 2913 (m) 124 FCC +2,3	29	63.546 <b>Cu</b> 1.90 Cobre 8.92 7.7264 1084.62 2927 (m) 128 FCC +1,2												
37	85.4678 <b>Rb</b> 0.82 Rubidio 1.532 4.1771 39.31 688 (m) 248 BCC +1	38	87.62 <b>Sr</b> 0.95 Estroncio 2.63 5.6949 777 1382 (m) 215 FCC +2	39	88.90585 <b>Y</b> 1.22 Itrio 4.472 6.2173 1526 3345 (m) 180 HCP +3	40	91.224 <b>Zr</b> 1.33 Zirconio 6.511 6.6339 1855 4409 (m) 160 HCP +4	41	92.90638 <b>Nb</b> 1.60 Niobio 8.57 6.7589 2477 4744 (m) 146 BCC +3,5	42	95.94 <b>Mo</b> 2.16 Molibdeno 10.28 7.0924 2623 4639 (m) 139 BCC +2,3,4,5,6	43	(98) <b>Tc</b> 1.9 Tecnecio 11.5 7.28 2157 4265 (m) 136 HCP +4,7	44	101.07 <b>Ru</b> 2.20 Rutenio 12.37 7.3605 2334 4150 (m) 134 HCP +2,3,4,6,8	45	102.9055 <b>Rh</b> 2.28 Rodio 12.45 7.4589 1964 3695 (m) 134 FCC +2,3,4	46	106.42 <b>Pd</b> 2.20 Paladio 12.023 8.3369 1554.9 2963 (m) 137 FCC +2,4	47	107.8682 <b>Ag</b> 1.93 Plata 10.49 7.5762 961.78 2162 (m) 144 FCC +1	55	132.90545 <b>Cs</b> 0.79 Cesio 1.879 3.8939 28.44 671 (m) 265 BCC +1	56	137.327 <b>Ba</b> 0.89 Bario 3.51 5.2117 727 1870 (m) 222 BCC +2	Serie de los Lantánidos		72	178.49 <b>Hf</b> 1.3 Hafnio 13.31 6.8251 2233 4603 (m) 159 HCP +4	73	180.9479 <b>Ta</b> 1.5 Tántalo 16.65 7.5496 3017 5458 (m) 146 BCC +5	74	183.84 <b>W</b> 2.36 Tungsteno 19.25 7.8640 3422 5555 (m) 139 BCC +2,3,4,5,6	75	186.207 <b>Re</b> 1.9 Renio 21.02 7.8335 3186 5596 (m) 137 HCP +2,4,6,7,-1	76	190.23 <b>Os</b> 2.2 Osmio 22.61 8.4382 3033 5012 (m) 135 HCP +2,3,4,6,8	77	192.217 <b>Ir</b> 2.2 Iridio 22.65 8.9670 2466 4428 (m) 136 FCC +2,3,4,6	78	195.078 <b>Pt</b> 2.28 Platino 21.09 8.9588 1768.3 3825 (m) 139 FCC +2,4	79	196.96655 <b>Au</b> 2.54 Oro 19.3 9.2255 1064.18 2856 (m) 144 FCC +1,3
87	(223) <b>Fr</b> 0.7 Francio - 4.0727 - - - - +1	88	(226) <b>Ra</b> 0.9 Radio 5 5.2784 700 1737 - BCC +2	Serie de los Actínidos		104	(261) <b>Rf</b> Rutherfordio 6.0 ? +4	105	(262) <b>Db</b> Dubnio +5	106	(266) <b>Sg</b> Seaborgio +2,3,4,5,6	107	(264) <b>Bh</b> Bohrio +2,4,6,7,-1	108	(277) <b>Hs</b> Hassio +2,3,4,6,8	109	(268) <b>Mt</b> Meitnerio +2,3,4,6	110	(281) <b>Ds</b> Darmstadtio +2,4	111	(272) <b>Rg</b> Roentgenio +1,3																						

Fase a condiciones estandar  
Gas Liquido Solido

Categorías

Metales alcalinos	Gases nobles
Metales alcalinoterreos	Halogenos
Metales de transición	No metales
Tierras raras	Metaloides

Número Atómico	1	1.00794	Masa Atómica
Simbolo	<b>H</b>	2.2	*Electronegatividad (Pauling)
Nombre	Hidrógeno	0.0899 13.5984	*Energía de Ionización (eV)
*Densidad [Nota]	-259.14 -252.87	(v) 37 FCC	*Punto de ebullición (°C)
*Punto de fusión (°C)			Estructura Cristalina [Nota]
Radio atómico (pm) [Nota]			Posibles Estados de Oxidación [Nota]
			+1,-1

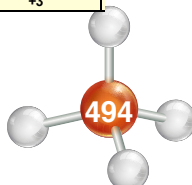
Notes:  
-unidades de densidad para solidos g/cm<sup>3</sup> y g/L o kg/cm<sup>3</sup> a 0° Celsius para gases.  
- Masa atómica basada en <sup>12</sup>C  
- ( ) indica la unidad de masa para el isótopo mas estable.  
- En negritas el estado de oxidación más común  
- (m) radio metálico, (v) radio covalente

Lantánidos

57	138.9055 <b>La</b> 1.10 Lantano 6.146 5.5769 920 3464 (m) 187 $\zeta$ hex +3	58	140.116 <b>Ce</b> 1.12 Cerio 6.689 5.5387 798 3360 (m) 182 FCC +3,4	59	140.90765 <b>Pr</b> 1.13 Praseodimio 6.64 5.473 931 3290 (m) 182 $\zeta$ hex +3,4	60	144.24 <b>Nd</b> 1.14 Neodimio 7.01 5.5250 1021 3100 (m) 181 $\zeta$ hex +3	61	(145) <b>Pm</b> - Promecio 7.264 5.582 1100 3000 (m) 183 HCP +3	62	150.36 <b>Sm</b> 1.17 Samario 7.353 5.6437 1072 1803 (m) 180 $\zeta$ hex +2,3	63	151.964 <b>Eu</b> - Europio 5.244 5.6704 822 1527 (m) 180 BCC +2,3	64	157.25 <b>Gd</b> 1.20 Gadolinio 7.901 6.1498 1313 3250 (m) 180 HCP +3
----	---	----	--	----	--	----	--	----	--	----	--	----	---	----	--

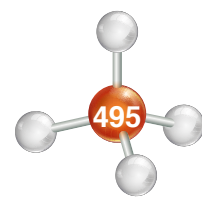
Actínidos

89	(227) <b>Ac</b> 1.1 Actinio 10.07 5.17 1050 3200 - FCC +3	90	232.0381 <b>Th</b> 1.3 Torio 11.724 6.3067 1750 4820 (m) 179 FCC +4	91	231.0359 <b>Pa</b> 1.5 Protactinio 15.37 5.89 1572 4000 (m) 163 $\zeta$ tetra +4,5	92	238.0289 <b>U</b> 1.38 Uranio 19.05 6.1941 1135 3927 (m) 156 BCP +3,4,5,6	93	(237) <b>Np</b> 1.36 Neptunio 20.45 6.2657 644 4000 (m) 155 SO +3,4,5,6	94	(244) <b>Pu</b> 1.28 Plutonio 19.816 6.0260 640 3230 (m) 159 $\zeta$ mono. +3,4,5,6	95	(243) <b>Am</b> 1.3 Americio - 5.9738 1176 2011 (m) 173 HCP +3,4,5,6	96	(247) <b>Cm</b> 1.3 Curio 13.51 5.9914 1345 3110 (m) 174 HCP +3
----	--	----	--	----	---	----	--	----	--	----	--	----	---	----	--





													18 VIIIA	
													2 4.002602	
													<b>He</b> - Helio 0.1785 24.5874 - -268.93 (v) 32 - 0	
			13 IIIA		14 IVA		15 VA		16 VIA		17 VIIA			
													10 20.1797	
													<b>Ne</b> - Neón 0.9 21.5645 -248.59 -246.08 (v) 69 - 0	
													9 18.9984032	
													<b>F</b> 3.98 Fluor 1.696 17.4228 -219.6 -188.12 (v) 71 - -1	
													8 15.9994	
													<b>O</b> 3.44 Oxígeno 1.429 13.6181 -218.3 -182.9 (v) 73 - -2	
													7 14.0067	
													<b>N</b> 3.04 Nitrógeno 1.251 14.5341 -210.1 -195.79 (v) 75 - +2,3,4,5,-2,-3	
													6 12.0107	
													<b>C</b> 2.55 Carbón 2.26 11.2603 3550 4027 (v) 77 hex +2,4,-4	
													5 10.811	
													<b>B</b> 2.04 Boro 2.46 8.2980 2075 4000 (v) 82 rhom. +3	
												12 IIB		
													13 26.981538	
													<b>Al</b> 1.61 Aluminio 2.7 5.9858 660.32 2519 (m) 143 FCC +3	
													14 28.0855	
													<b>Si</b> 1.90 Silicio 2.33 8.1517 1414 2900 (v) 111 cubic +2,4,-4	
													15 30.97361	
													<b>P</b> 2.19 Fósforo 1.823 10.4867 44.2 280.5 (v) 106 § +3,4,5,-3	
													16 32.065	
													<b>S</b> 2.58 Azufre 1.96 10.3600 115.21 444.72 (v) 102 FCO +2,4,6,-2	
													17 35.453	
													<b>Cl</b> 3.16 Cloro 3.214 12.9676 -101.5 -34.04 (v) 99 - +1,3,5,7,-1	
													18 39.948	
													<b>Ar</b> - Argón 1.784 15.7596 -189.3 -185.8 (v) 97 - 0	
													30 65.409	
													<b>Zn</b> 1.65 Zinc 7.14 9.3942 419.53 907 (m) 134 §hex +2	
													31 69.723	
													<b>Ga</b> 1.81 Galio 5.904 5.9993 29.76 2204 (m) 135 §BCO +3	
													32 72.64	
													<b>Ge</b> 2.01 Germanio 5.323 7.8994 938.3 2820 (v) 122 §cubic +2,4	
													33 74.92160	
													<b>As</b> 2.18 Arsénico 5.727 9.7886 817 614 (v) 119 rhom. +3,5,-3	
													34 78.96	
													<b>Se</b> 2.55 Selenio 4.819 9.7524 221 685 (v) 116 §hex +2,4,6,-2	
													35 79.904	
													<b>Br</b> 2.96 Bromo 3.12 11.8138 -7.3 59 (v) 114 BCO +1,5,-1	
													36 83.798	
													<b>Kr</b> 3 Kriptón 3.75 13.9996 -157.36 -153.22 (v) 110 - 0	
													48 112.411	
													<b>Cd</b> 1.69 Cadmio 8.65 8.9938 321.07 767 (m) 151 §hex +2	
													49 114.818	
													<b>In</b> 1.78 Indio 7.31 5.7864 156.6 2072 (m) 167 §tetra. +3	
													50 118.710	
													<b>Sn</b> 1.96 Estaño 7.31 7.3439 231.93 2602 (v) 141 §tetra. +2,4	
													51 121.760	
													<b>Sb</b> 2.05 Antimonio 6.697 8.6084 630.63 1587 (v) 138 §rhom. +3,5,-3	
													52 127.60	
													<b>Te</b> 2.10 Telurio 6.24 9.0096 449.51 988 (v) 135 hex +2,4,6,-2	
													53 126.90447	
													<b>I</b> 2.66 Yodo 4.94 10.4513 113.7 184.3 (v) 133 BCO +1,5,7,-1	
													54 131.293	
													<b>Xe</b> 2.60 Xenon 5.9 12.1298 -111.8 -108 (v) 130 - 0	
													80 200.59	
													<b>Hg</b> 2 Mercurio 13.534 10.4375 -38.83 356.73 (m) 151 §rhom. +1,2	
													81 204.3833	
													<b>Tl</b> 1.62 Talio 11.85 6.1082 304 1473 (m) 170 HCP +1,3	
													82 207.2	
													<b>Pb</b> 2.33 Plomo 11.34 7.4167 327.46 1749 (m) 175 FCC +2,4	
													83 208.98038	
													<b>Bi</b> 2.02 Bismuto 9.78 7.2855 271.3 1564 (v) 146 §rhom. +3,5	
													84 (209)	
													<b>Po</b> 2.0 Polonio 9.196 8.414 254 962 - §cubic +2,4	
													85 (210)	
													<b>At</b> 2.2 Astatio 302 - - - - - +1,3,5,7,-1	
													86 (222)	
													<b>Rn</b> - Radón 9.73 10.7485 -71 -61.7 (v) 145 - 0	
													112 (285)	
													<b>Cn</b> - Copernicio	
													113 (286)	
													<b>Uut</b> - Ununtrium	
													114 (289)	
													<b>Uuq</b> - Ununquadium	
													115 (290)	
													<b>Uup</b> - Ununpentium	
													116 (292)	
													<b>Uuh</b> - Ununhexium	
													117 (293)	
													<b>Uus</b> - Ununseptium	
													118 (294)	
													<b>Uuo</b> - Ununoctium	
													65 158.92534	
													<b>Tb</b> - Terbio 8.219 5.8638 1356 3230 (m) 177 HCP +3,4	
													66 162.500	
													<b>Dy</b> 1.22 Disprobio 8.551 5.9389 1412 2567 (m) 178 HCP +3	
													67 164.93032	
													<b>Ho</b> 1.23 Holmio 8.795 6.0215 1474 2700 (m) 176 HCP +3	
													68 167.259	
													<b>Er</b> 1.24 Erbio 9.066 6.1077 1497 2868 (m) 176 HCP +3	
													69 168.93421	
													<b>Tm</b> 1.25 Tulio 9.321 6.1843 1545 1950 (m) 176 HCP +2,3	
													70 173.04	
													<b>Yb</b> - Iterbio 6.57 6.2542 819 1196 (m) 176 FCC +2,3	
													71 174.967	
													<b>Lu</b> 1.27 Lutecio 9.841 5.4259 1663 3402 (m) 174 HCP +3	
													97 (247)	
													<b>Bk</b> 1.3 Berkelio 14.78 6.1979 1050 - (m) 170 hex +3,4	
													98 (251)	
													<b>Cf</b> 1.3 Californio 15.1 6.2817 900 - - hex +3	
													99 (252)	
													<b>Es</b> 1.3 Einstenio - 6.42 860 - - - +3	
													100 (257)	
													<b>Fm</b> 1.3 Fermio - 6.50 1527 - - - +3	
													101 (258)	
													<b>Md</b> 1.3 Medelevio - 6.58 827 - - - +2,3	
													102 (259)	
													<b>No</b> 1.3 Nobelio - 6.65 827 - - - +2,3	
													103 (262)	
													<b>Lr</b> - Laurencio - 4.9 ? 1627 - - - +3	

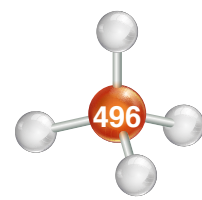




## Principio de Aufbau <sup>[1]</sup>

Valor de los números cuánticos para el electrón diferencial de cada elemento.

No. Atómico	Símbolo	Nivel	Orbital	$n$	$l$	$m$	$s$	No. de orbitales	No. de electrones en subniveles	No. de electrones en nivel completo
1	H	K	1S	1	0	0	½	1		
2	He	K	1S	1	0	0	-½	1	2	2
3	Li	L	2S	2	0	0	½	1		
4	Be	L	2S	2	0	0	-½	1	2	
5	B	L	2p	2	1	1	½	3		
6	C	L	2p	2	1	0	½	3		
7	N	L	2p	2	1	-1	½	3		
8	O	L	2p	2	1	-1	-½	3		
9	F	L	2p	2	1	0	-½	3		
10	Ne	L	2p	2	1	1	-½	3	6	8
11	Na	M	3s	3	0	0	½	1		
12	Mg	M	3s	3	0	0	-½	1	2	
13	Al	M	3p	3	1	1	½	3		
14	Si	M	3p	3	1	0	½	3		
15	P	M	3p	3	1	-1	½	3		
16	S	M	3p	3	1	-1	-½	3		
17	Cl	M	3p	3	1	0	-½	3		
18	Ar	M	3p	3	1	1	-½	3	6	8
19	K	N	4s	4	0	0	½	1		
20	Ca	N	4s	4	0	0	-½	1		
21	Sc	M	3d	3	2	2	½	5		
22	Ti	M	3d	3	2	1	½	5		
23	V	M	3d	3	2	0	½	5		
24	Cr	M	3d	3	2	-1	½	5		
25	Mn	M	3d	3	2	-2	½	5		
26	Fe	M	3d	3	2	-2	-½	5		
27	Co	M	3d	3	2	-1	-½	5		
28	Ni	M	3d	3	2	0	-½	5		
29	Cu	M	3d	3	2	1	-½	5	10	
30	Zn	M	3d	3	2	2	-½	5		
31	Ga	N	4p	4	1	1	½	3		
32	Ge	N	4p	4	1	0	½	3		
33	As	N	4p	4	1	-1	½	3		
34	Se	N	4p	4	1	-1	-½	3		
35	Br	N	4p	4	1	0	-½	3		
36	Kr	N	4p	4	1	1	-½	3	6	18





## Forma de los orbitales <sup>[10]</sup>

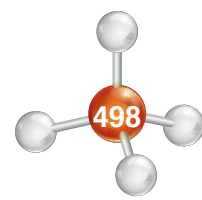
Tipo de electrones	Orbital	Descripción	Modelo
Electrones s	s	Forma esférica	
Electrones p	2p <sub>x</sub>	A lo largo del eje x	
	2p <sub>y</sub>	A lo largo del eje y	
	2p <sub>z</sub>	A lo largo del eje z	
Electrones d	d <sub>xy</sub>	En el plano x-y	
	d <sub>yz</sub>	En el plano y-z	
	d <sub>xz</sub>	En el plano x-z	
	d <sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub>	A lo largo de los ejes x y y, y más allá de los orbitales	
	d <sub>z<sup>2</sup></sub>	A lo largo y alrededor del eje z	



### Forma de moléculas predichas de acuerdo con la teoría de la repulsión de pares de electrones de valencia dirigida<sup>[1]</sup>

Número total de pares de e <sup>-</sup> en el átomo central	Forma molecular	Número de coordinación del átomo central	Tipos de pares de e <sup>-</sup> del átomo central	Fórmula química	Geometría más estable		Ejemplos
					Nombre	Esquema	
2	Lineal	2	2 PE	AX <sub>2</sub>	Lineal		HgCl <sub>2</sub> , CdI <sub>2</sub> , [Ag(CN) <sub>2</sub> ] <sup>-1</sup>
3	Triangular	3	3 PE	AX <sub>3</sub>	Triángulo equilátero		BF <sub>3</sub> , BI <sub>3</sub> , GaI <sub>3</sub>
		2	2 PE, 1 PL	AX <sub>2</sub>	Forma de V		SnCl <sub>2</sub> , PbCl <sub>2</sub>
4	Tetraédrica	4	4 PE	AX <sub>4</sub>	Tetraédrica		CH <sub>4</sub> , [BF <sub>4</sub> ] <sup>-1</sup> , SnX <sub>4</sub>
		3	3 PE, 1 PL	AX <sub>3</sub>	Piramidal trigonal		NH <sub>3</sub> , H <sub>3</sub> O <sup>+1</sup> , PH <sub>3</sub>
		2	2 PE, 2 PL	AX <sub>2</sub>	Forma de V		H <sub>2</sub> O, H <sub>2</sub> S
5	Bipiramidal trigonal	5	5 PE	AX <sub>5</sub>	Bipiramidal trigonal		PCl <sub>5</sub> , SbCl <sub>5</sub> , VO <sub>3</sub> <sup>-1</sup>
		4	4 PE, 1 PL	AX <sub>4</sub>	Tetraedro irregular		SF <sub>4</sub> , TeCl <sub>4</sub> , R <sub>2</sub> SeCl <sub>2</sub>
		3	3 PE, 2 PL	AX <sub>3</sub>	En forma de T		ClF <sub>3</sub> , BrF <sub>3</sub>
		2	2 PE, 3 PL	AX <sub>2</sub>	Lineal		[ICl <sub>2</sub> ] <sup>-1</sup> , I <sub>3</sub> <sup>-1</sup>
6	Octaédrica	6	6 PE	AX <sub>6</sub>	Octaédrica		SF <sub>6</sub> , [SiF <sub>6</sub> ] <sup>-2</sup> , [PbCl <sub>6</sub> ] <sup>-2</sup>
		5	5 PE, 1 PS	AX <sub>5</sub>	Piramidal cuadrada		BrF <sub>5</sub> , IF <sub>5</sub>

PE= par de electrones enlazados; PL=par de electrones libres



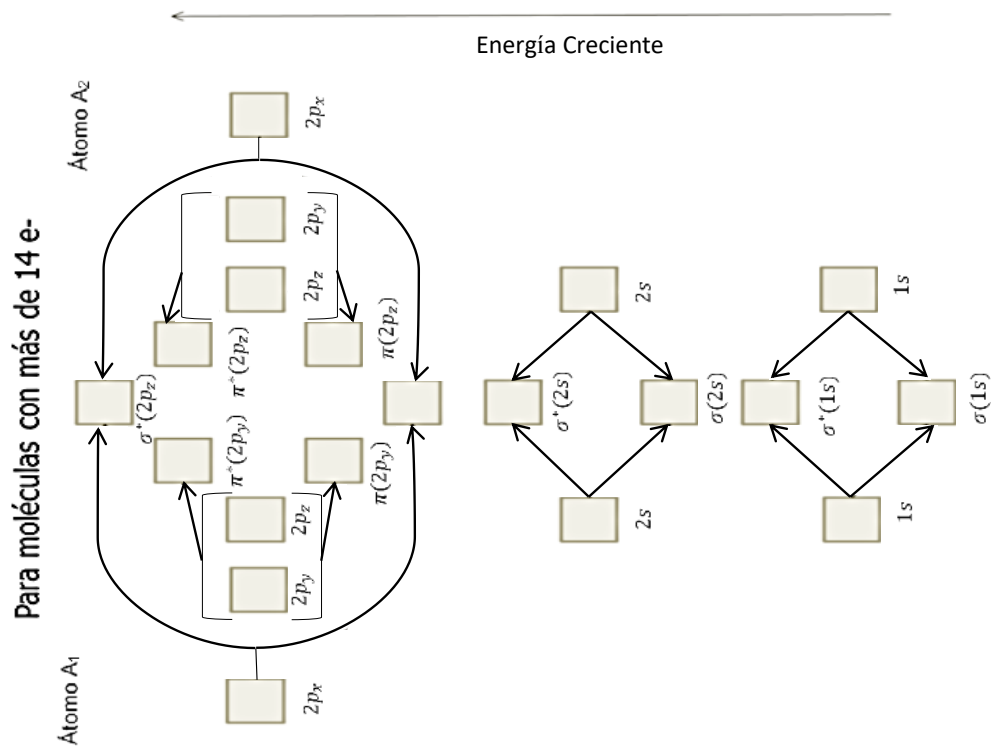




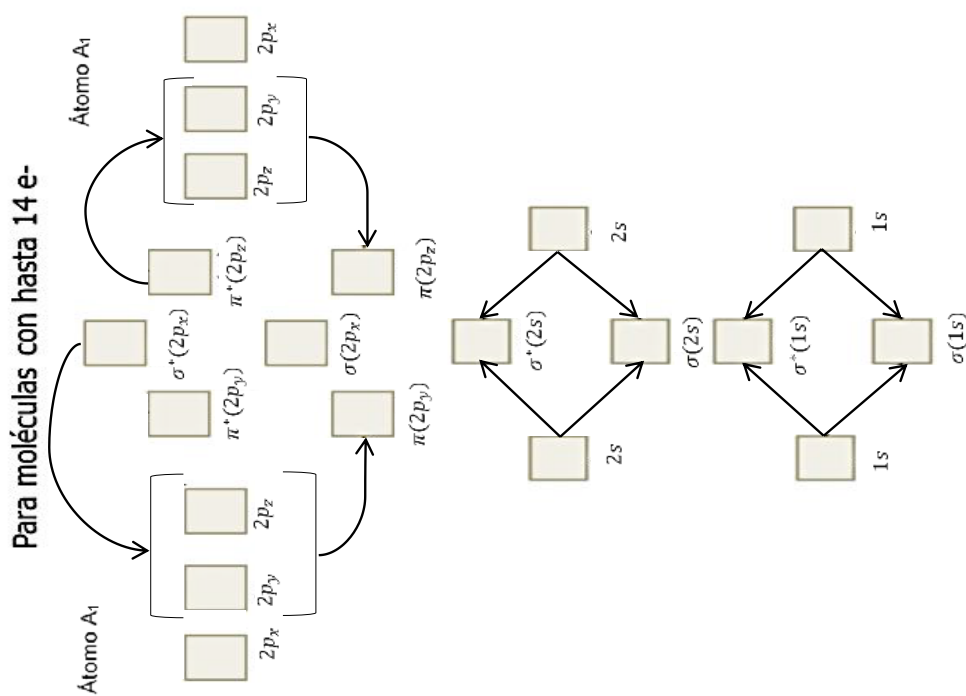
## Niveles de energía de orbitales moleculares

(Para los elementos desde el 1 hasta el 10)

(idealizado)\*



\*Algunas moléculas homonucleares tienen orbitales moleculares  $\sigma(2p_x)$  y  $\pi(2p_y)$ ,  $\pi(2p_z)$  en el orden inverso.



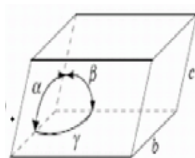


### Estructuras cristalinas [11]

Cúbica			
Simple	Centrada en las caras	Centrada en el cuerpo	
Ortorómbica			
Simple	Centrada en las caras de extremo	Centrada en el cuerpo	Centrada en las caras
Tetragonal		Monoclínica	
Simple	Centrada en el cuerpo	Simple	Centrada en las caras de extremo
Hexagonal		Romboedro	Triclínica

### Características de estructuras cristalinas [11]

Sistema	Características	Ejes en celda unitaria	Ángulos en celda unitaria
Cúbico	Tres ejes iguales y mutuamente perpendiculares	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	Dos ejes iguales y uno diferente, mutuamente perpendiculares	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Ortorómbico o rómbico	Tres ejes diferentes mutuamente perpendiculares	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Hexagonal o Trigonal	Tres ejes iguales inclinados a $120^\circ$ con un cuarto eje diferente y perpendicular a los otros tres	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$
Monoclínico	Dos ejes en un ángulo oblicuo con un tercer eje perpendicular a los otros dos	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma \neq 90^\circ$
Triclínico	Tres ejes diferentes intersectando de forma oblicua	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
Romboedro	Dos ejes iguales haciendo un ángulo semejante entre cada uno		



Celda unitaria

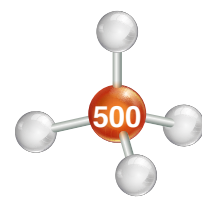




Tabla de iones monoatómicos más comunes (ordenado por carga) [5, 6]

Carga única			
Cationes		Aniones	
Símbolo	Nombre	Símbolo	Nombre
H <sup>+</sup>	Ion hidrógeno	H <sup>-</sup>	Hidruro
Li <sup>+</sup>	Ion litio	F <sup>-</sup>	Fluoruro
Na <sup>+</sup>	Ion sodio	Cl <sup>-</sup>	Cloruro
K <sup>+</sup>	Ion potasio	Br <sup>-</sup>	Bromuro
Rb <sup>+</sup>	Ion rubidio	I <sup>-</sup>	Yoduro
Cs <sup>+</sup>	Ion cesio	O <sup>2-</sup>	Óxido
Be <sup>2+</sup>	Ion berilio	S <sup>2-</sup>	Sulfuro
Mg <sup>2+</sup>	Ion magnesio	Se <sup>2-</sup>	Selenuro
Ca <sup>2+</sup>	Ion calcio	Te <sup>2-</sup>	Telururo
Sr <sup>2+</sup>	Ion estroncio	N <sup>3-</sup>	Nitruro
Ba <sup>2+</sup>	Ion bario	P <sup>3-</sup>	Fosfuro
Ra <sup>2+</sup>	Ion radio	As <sup>3-</sup>	Arsenuro
Ag <sup>2+</sup>	Ion plata		
Zn <sup>2+</sup>	Ion cinc		
Al <sup>3+</sup>	Ion aluminio		

Varias cargas		
Símbolo	Nombre	
	Sistemático	Común
Cu <sup>+</sup>	Ion cobre (I)	Cuproso
Cu <sup>2+</sup>	Ion cobre (II)	Cúprico
Fe <sup>2+</sup>	Ion hierro (II)	Ferroso
Fe <sup>3+</sup>	Ion hierro (III)	Férrico
Sn <sup>2+</sup>	Ion estaño (II)	
Sn <sup>4+</sup>	Ion estaño (IV)	
Cr <sup>2+</sup>	Ion cromo (II)	Cromoso
Cr <sup>3+</sup>	Ion cromo (III)	Crómico
Mn <sup>2+</sup>	Ion manganeso (II)	
Mn <sup>3+</sup>	Ion manganeso (III)	
Hg <sup>1+</sup>	Ion mercurio (I)	
Hg <sup>2+</sup>	Ion mercurio (II)	Mercúrico
Pb <sup>2+</sup>	Ion plomo (II)	Plumboso
Pb <sup>4+</sup>	Ion plomo (IV)	Plúmbico
Co <sup>2+</sup>	Ion cobalto (II)	Cobaltoso
Co <sup>3+</sup>	Ion cobalto (III)	Cobáltico
Au <sup>+</sup>	Ion oro (I)	Auroso
Au <sup>3+</sup>	Ion oro (III)	Áurico
Ni <sup>2+</sup>	Ion níquel (II)	
Ni <sup>4+</sup>	Ion níquel (IV)	

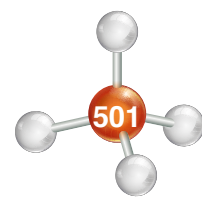




Tabla de iones poliatómicos [3, 5, 6]

Fórmula	Nombre Común	Fórmula	Nombre Común	Fórmula	Nómbre Cómún
$\text{OH}^-$	Hidróxido	$\text{O}^-$	Peróxido	$(\text{AsO}_2)^{3-}$	Metarsenito
$\text{CN}^-$	Cianuro	$\text{CO}_3^{2-}$	Carbonato	$(\text{AsO}_3)^{3-}$	Arsenito
$\text{OCN}^-$	Cianato	$\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$	Oxalato	$(\text{AsO}_4)^{3-}$	Arseniato
$\text{SCN}^-$	Tiocianato	$\text{HPO}_3^{2-}$	Hidrógenofosfito	$(\text{SbO}_3)^{3-}$	Antimonito
$\text{HCO}_3^-$	Hidrógenocarbonato	$\text{HPO}_4^{2-}$	Hidrógenofosfato	$(\text{SbO}_4)^{3-}$	Antimoniato
	(bicarbonato)	$\text{SO}_2^{2-}$	Hiposulfito	$(\text{BO}_3)^{3-}$	Borato
$\text{HSO}_3^-$	Hidrógenosulfito	$\text{SO}_3^{2-}$	Sulfito	$(\text{BO}_4)^{3-}$	Perborato
$\text{HSO}_4^-$	Hidrógenosulfato	$\text{SO}_4^{2-}$	Sulfato	$(\text{BiO}_3)^{3-}$	Bismutito
$\text{H}_2\text{PO}_2^-$	Hipofosfito	$\text{S}_2\text{O}_2^{2-}$	Tiosulfito	$(\text{AlO}_4)^{3-}$	Peraluminato
$\text{H}_2\text{PO}_3^-$	Dihidrógenofosfito	$\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$	Tiosulfato	$[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$	Ferricianuro
$\text{H}_2\text{PO}_4^-$	Dihidrógenofosfato	$\text{S}_2\text{O}_5^{2-}$	Pirosulfito	$[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$	Ferrocianuro
$\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2^-$	Acetato	$\text{S}_2\text{O}_6^{2-}$	Hiposulfato	$(\text{P}_2\text{O}_5)^{4-}$	Pirofosfito
$\text{PO}_2^-$	Metafosfito	$\text{S}_2\text{O}_7^{2-}$	Pirosulfato	$(\text{P}_2\text{O}_7)^{4-}$	Pirofosfato
$\text{PO}_3^-$	Metafosfato	$\text{SiF}_6^{2-}$	Fluorsilicato	$(\text{SiO}_4)^{4-}$	Ortosilicato
$\text{AsO}_3^-$	Metarseniato	$\text{SiO}_3^{2-}$	Metasilicato	$(\text{SnO}_4)^{4-}$	Ortoestano
$\text{SbO}_2^-$	Metantimonito	$\text{SnO}_2^{2-}$	Estanito	$(\text{PbO}_4)^{4-}$	Ortoplumbato
$\text{SbO}_3^-$	Metantimoniato	$\text{SnO}_3^{2-}$	Estanato	$(\text{TiO}_4)^{4-}$	Ortotitaniato
$\text{BO}_2^-$	Metaborato	$\text{ZnO}_2^{2-}$	Zincato	$(\text{CO}_4)^{4-}$	Ortcarbonato
$\text{AlO}_2^-$	Aluminato	$\text{SeO}_3^{2-}$	Selenito	$(\text{NH}_4)^+$	Ion Amonio
$\text{NO}_2^-$	Nitrito	$\text{SeO}_4^{2-}$	Seleniato		
$\text{NO}_3^-$	Nitrato	$\text{TeO}_3^{2-}$	Telurito(Teluronito)	$(\text{PH}_4)^+$	Fosfonio
$\text{BiO}_3^-$	Bismutato				
$\text{BrO}^-$	Hipobromito	$\text{TeO}_4^-$	Telurato (Teluronato)	$(\text{H}_3\text{O})^+$	Ion Hidronio
$\text{BrO}_2^-$	Bromito	$\text{CrO}_4^{2-}$	Cromato		
$\text{BrO}_4^-$	Bromato	$\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$	Dicromato	$(\text{UO}_2)^+$	Uranilo
$\text{ClO}^-$	Hipoclorito	$\text{MoO}_4^{2-}$	Molibdato	$(\text{CO})^+$	Carbonilo
$\text{ClO}_2^-$	Clorito	$\text{MnO}_3^{2-}$	Manganito	$(\text{CH}_3\text{COO})^-$	Acetato
$\text{ClO}_3^-$	Clorato	$\text{MnO}_4^{2-}$	Manganato		
$\text{ClO}_4^-$	Perclorato	$\text{ReO}_4^{2-}$	Reniato		
$\text{IO}^-$	Hipoyodito	$\text{TiO}_3^{2-}$	Metitanato		
$\text{IO}_2^-$	Yodito	$\text{PbO}_2^{2-}$	Plumbito		
$\text{IO}_3^-$	Yodato	$\text{PbO}_3^{2-}$	Plumbato		
$\text{IO}_4^-$	Peryodato	$\text{B}_4\text{O}_7^{2-}$	Tetraborato		
$\text{MnO}_4^-$	Permanganato	$\text{PO}_3^{3-}$	Fosfito		
$\text{ReO}_4^-$	Perreniato	$\text{PO}_4^{4-}$	Fosfato		

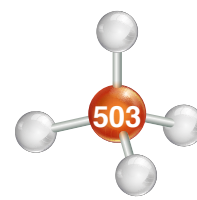


Constantes de disociación para ácidos (Ka) (298.15 K y al nivel del mar) [3, 4]

Ácidos	Ecuación de equilibrio	K <sub>a</sub>
Acético	$\text{HC}_2\text{H}_3\text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2^-$	$1.8 \times 10^{-5}$
Aluminio (hidróxido)	$\text{Al}(\text{OH})_3 \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{AlO}_2^-$	$4.0 \times 10^{-13}$
Aluminio (ion)	$\text{Al}^{3+} + 2\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{AlOH}^{2+}$	$1.4 \times 10^{-5}$ (K <sub>h</sub> )
Amonio (ion)	$\text{NH}_4^+ + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{NH}_3$	$5.6 \times 10^{-10}$ (K <sub>h</sub> )
Antimonio (III) hidróxido	$\text{SbOOH} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{SbO}_2^-$	$1.0 \times 10^{-11}$
Arsénico (orto)	$\text{H}_3\text{AsO}_4 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{H}_2\text{AsO}_4^-$	$2.5 \times 10^{-4}$
	$\text{H}_3\text{AsO}_4^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HAsO}_4^{2-}$	$5.6 \times 10^{-8}$
	$\text{HAsO}_4^{2-} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{AsO}_4^{3-}$	$3.0 \times 10^{-13}$
Arsenoso (meta)	$\text{HAsO}_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{AsO}_2^-$	$6.0 \times 10^{-10}$
Benzoico	$\text{HC}_7\text{H}_5\text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{C}_7\text{H}_5\text{O}_2^-$	$6.6 \times 10^{-5}$
Bismuto (III) ion	$\text{Bi}^{3+} + 2\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{BiOH}^{2+}$	$1 \times 10^{-2}$ (K <sub>h</sub> )
Bórico (orto)	$\text{H}_3\text{BO}_3 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{H}_2\text{BO}_3^-$	$6.0 \times 10^{-10}$
Bromhídrico	$\text{HBr} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{Br}^-$	Grande
N-butírico	$\text{HC}_4\text{H}_7\text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{C}_4\text{H}_7\text{O}_2^-$	$1.5 \times 10^{-5}$
Carbónico	$\text{H}_2\text{CO}_3 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HCO}_3^-$	$4.2 \times 10^{-7}$
	$\text{HCO}_3^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CO}_3^{2-}$	$4.8 \times 10^{-11}$
Cianhídrico	$\text{HCN} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CN}^-$	$4.0 \times 10^{-10}$
Cinc (hidróxido)	$\text{Zn}(\text{OH})_2 + 2\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow 2\text{H}_3\text{O}^+ + \text{ZnO}_2^{2-}$	$1.0 \times 10^{-29}$
Cinc (ion)	$\text{Zn}^{2+} + 2\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{ZnOH}^+$	$2.5 \times 10^{-10}$ (K <sub>h</sub> )
Cítrico	$\text{H}_3\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{H}_2\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7^-$	$8.4 \times 10^{-4}$
	$\text{H}_2\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HC}_6\text{H}_5\text{O}_7^{2-}$	$1.8 \times 10^{-5}$
	$\text{HC}_6\text{H}_5\text{O}_7^{2-} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7^{3-}$	$4.0 \times 10^{-6}$
Cloracético	$\text{HC}_2\text{H}_2\text{ClO}_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{C}_2\text{H}_2\text{ClO}_2^-$	$1.4 \times 10^{-3}$
Clorhídrico	$\text{HCl} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{Cl}^-$	Grande
Cobre (II) (hidróxido)	$\text{Cu}(\text{OH})_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HCuO}_2^-$	$1.0 \times 10^{-19}$
	$\text{HCuO}_2^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CuO}_2^{2-}$	$7.9 \times 10^{-14}$
Cobre (II) (ion)	$\text{Cu}^{2+} + 2\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CuOH}^+$	$1 \times 10^{-8}$ (K <sub>h</sub> )
Crómico	$\text{H}_2\text{CrO}_4 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HCrO}_4^-$	$\approx 10^{-1}$
Cromo (III)(hidróxido)	$\text{Cr}(\text{OH})_3 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CrO}_2^-$	$9 \times 10^{-17}$
Cromo (III) (ion)	$\text{Cr}^{3+} + 2\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CrOH}^{2+}$	$1 \times 10^{-4}$ (K <sub>h</sub> )
Dicloracético	$\text{HC}_2\text{HCl}_2\text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{C}_2\text{HCl}_2\text{O}_2^-$	$3.3 \times 10^{-2}$
Estaño (IV) (hidróxido)	$\text{Sn}(\text{OH})_4 + 4\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow 2\text{H}_3\text{O}^+ + [\text{Sn}(\text{OH})_6]^{2-}$	$\approx 10^{-32}$
Estaño (II) (hidróxido)	$\text{Sn}(\text{OH})_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HSnO}_2^-$	$3.8 \times 10^{-15}$
Fórmico	$\text{HCHO}_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CHO}_2^-$	$2.1 \times 10^{-4}$
Fosfórico (orto)	$\text{H}_3\text{PO}_4 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{H}_2\text{PO}_4^-$	$7.5 \times 10^{-3}$
	$\text{H}_2\text{PO}_4^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HPO}_4^{2-}$	$6.2 \times 10^{-8}$
	$\text{HPO}_4^{2-} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{PO}_4^{3-}$	$\approx 10^{-12}$
O-ftálico	$\text{H}_2\text{C}_8\text{H}_4\text{O}_4 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HC}_8\text{H}_4\text{O}_4^-$	$1.3 \times 10^{-3}$
	$\text{HC}_8\text{H}_4\text{O}_4^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{C}_8\text{H}_4\text{O}_4^{2-}$	$3.9 \times 10^{-6}$

K<sub>h</sub> = Constante de hidrólisis

Continúa...



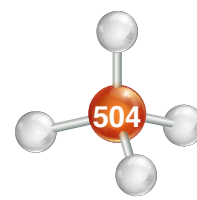




Ácidos	Ecuación de equilibrio	K <sub>a</sub>
M-ftálico	$H_2C_8H_4O_4 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + HC_8H_4O_4^-$	$2.9 \times 10^{-4}$
	$HC_8H_4O_4^- + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + C_8H_4O_4^{2-}$	$2.5 \times 10^{-5}$
P-ftálico	$H_2C_8H_4O_4 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + HC_8H_4O_4^-$	$3.1 \times 10^{-4}$
	$HC_8H_4O_4^- + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + C_8H_4O_4^{2-}$	$1.5 \times 10^{-5}$
Fluorhídrico	$HF + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + F^-$	$6.7 \times 10^{-4}$
Hexacianoférrico (III)	$H_3(Fe(CN)_6) + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + H_2(Fe(CN)_6)^-$	grande
	$H_2(Fe(CN)_6)^- + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + H(Fe(CN)_6)^{2-}$	grande
	$H(Fe(CN)_6)^{2-} + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + Fe(CN)_6^{3-}$	grande
	$H_4(Fe(CN)_6) + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + H_3(Fe(CN)_6)^-$	grande
Hexacianoférrico (II)	$H_3(Fe(CN)_6)^- + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + H_2(Fe(CN)_6)^{2-}$	grande
	$H_2(Fe(CN)_6)^{2-} + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + H(Fe(CN)_6)^{3-}$	$\approx 10^{-3}$
	$H(Fe(CN)_6)^{3-} + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + Fe(Cn)_6^{4-}$	$5.6 \times 10^{-5}$
Hierro (III) (ion)	$Fe^{3+} + 2H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + FeOH^{2+}$	$4.0 \times 10^{-3}$ (K <sub>h</sub> )
Hierro (II) (ion)	$Fe^{2+} + 2H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + FeOH^+$	$1.2 \times 10^{-6}$ (K <sub>h</sub> )
Hipocloroso	$HClO + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + ClO^-$	$3.2 \times 10^{-8}$
Láctico	$HC_3H_5O_3 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + C_2HCl_2O_2^-$	$8.4 \times 10^{-4}$
Magnesio (ion)	$Mg^{2+} + 2H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + MgOH^+$	$2.0 \times 10^{-12}$ (K <sub>h</sub> )
Mercurio (II) (ion)	$Hg^{2+} + 2H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + HgOH^+$	$2.0 \times 10^{-3}$ (K <sub>h</sub> )
Nítrico	$HNO_3 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + NO_3^-$	grande
Nitroso	$HNO_2 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + NO_2^-$	$4.5 \times 10^{-4}$
	$H_2C_2O_4 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + HC_2O_4^-$	$3.8 \times 10^{-2}$
Oxálico	$HC_2O_4^- + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + C_2O_4^{2-}$	$5.0 \times 10^{-5}$
Perclórico	$HClO_4 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + ClO_4^-$	grande
Permangánico	$HMnO_4 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + MnO_4^-$	grande
Peróxido de hidrógeno	$H_2O_2 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + HO_2^-$	$2.4 \times 10^{-12}$
Pítrico	$HC_6H_2N_3O_7 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + C_6H_2N_3O_7^-$	$4.2 \times 10^{-1}$
Plomo (II) (hidróxido)	$Pb(OH)_2 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + HPbO_2^-$	$4.6 \times 10^{-16}$
Propiónico (propanoico)	$HC_3H_5O_2 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + C_3H_5O_2^-$	$1.4 \times 10^{-5}$
Salicílico	$HC_7H_5O_3 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + C_7H_5O_3^-$	$1.0 \times 10^{-3}$
Silícico (meta)	$H_2SiO_3 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + HSiO_3^-$	$3.2 \times 10^{-10}$
	$HSiO_3^- + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + SiO_3^{2-}$	$6.3 \times 10^{-12}$
Sulfámico	$HNH_2SO_3 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + NH_2SO_3^-$	$1.0 \times 10^{-1}$
Sulfhídrico	$H_2S + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + HS^-$	$1.0 \times 10^{-7}$
Sulfúrico	$HS^- + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + S^{2-}$	$1.3 \times 10^{-13}$
	$H_2SO_4 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + HSO_4^-$	grande
Sulfuroso	$HSO_4^- + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + SO_4^{2-}$	$1.3 \times 10^{-2}$
	$H_2SO_3 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + HSO_3^-$	$1.3 \times 10^{-2}$
Tartárico	$HSO_3^- + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + SO_3^{2-}$	$5.6 \times 10^{-8}$
	$H_2C_4H_4O_6 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + HC_4H_4O_6^-$	$1.0 \times 10^{-3}$
Tiocianico	$HC_4H_4O_6^- + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + C_4H_4O_6^{2-}$	$4.3 \times 10^{-5}$

K<sub>h</sub> = Constante de hidrólisis

Continúa...



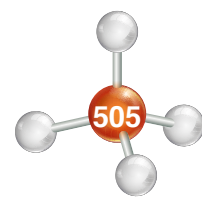


Ácidos	Ecuación de equilibrio	K <sub>a</sub>
Tiosulfúrico	$\text{HNCS} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{NCS}^-$	grande
	$\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_3 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HS}_2\text{O}_3^-$	$2.0 \times 10^{-2}$
Tricloracético	$\text{HS}_2\text{O}_3^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{S}_2\text{O}_3^{2-}$	$3.2 \times 10^{-3}$
	$\text{HC}_2\text{Cl}_3\text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{C}_2\text{Cl}_3\text{O}_2^-$	$2.0 \times 10^{-1}$
Yodhídrico	$\text{HI} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{I}^-$	grande

Constantes de disociación para bases ( K<sub>b</sub>) (298.15K y a nivel del mar) [3, 4]

Bases	Ecuación de equilibrio	K <sub>b</sub>
Acetato (ion)	$\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{HC}_2\text{H}_3\text{O}_2 + \text{OH}^-$	$5.6 \times 10^{-10}$ (Kh)
Amoniaco	$\text{NH}_3 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{NH}_4^+ + \text{OH}^-$	$1.8 \times 10^{-5}$
Anilina	$\text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_3^+ + \text{OH}^-$	$3.8 \times 10^{-10}$
Arsenato (ion) (orto)	$\text{AsO}_4^{3-} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{HAsO}_4^{2-} + \text{OH}^-$	$3.3 \times 10^{-2}$ (Kh)
	$\text{HAsO}_4^{2-} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_2\text{AsO}_4^- + \text{OH}^-$	$1.8 \times 10^{-7}$ (Kh)
	$\text{H}_2\text{AsO}_4^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{AsO}_4 + \text{OH}^-$	$4.0 \times 10^{-11}$ (Kh)
Arsenito (ion) (meta)	$\text{AsO}_2^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{HAsO}_2 + \text{OH}^-$	$1.6 \times 10^{-5}$ (Kh)
Borato (ion)	$\text{H}_2\text{BO}_3^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{BO}_3 + \text{OH}^-$	$1.6 \times 10^{-5}$ (Kh)
Tetraborate (ion)	$\text{B}_4\text{O}_7^{2-} + 5\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow 2\text{H}_2\text{BO}_3^- + 2\text{H}_3\text{BO}_3$	$\approx 10^{-3}$
Bromuro	$\text{Br} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{HBr} + \text{OH}^-$	Muy pequeño
Carbonato (ion)	$\text{HCO}_3^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_2\text{CO}_3 + \text{OH}^-$	$2.4 \times 10^{-8}$ (Kh)
	$\text{CO}_3^{2-} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{HCO}_3^- + \text{OH}^-$	$2.1 \times 10^{-4}$ (Kh)
Cianurio (ion)	$\text{CN}^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{HCN} + \text{OH}^-$	$2.5 \times 10^{-3}$ (Kh)
Cloruro (ion)	$\text{Cl}^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{HCl} + \text{OH}^-$	Muy pequeño
Cromato (ion)	$\text{CrO}_4^{2-} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{HCrO}_4^- + \text{OH}^-$	$3.0 \times 10^{-8}$ (Kh)
Dimetilamina	$(\text{CH}_3)_2\text{NH} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow (\text{CH}_3)_2\text{NH}_2^+ + \text{OH}^-$	$5.1 \times 10^{-4}$
Etanolamina	$\text{HO}(\text{CH}_2)_2\text{NH}_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{HO}(\text{CH}_2)_2\text{NH}_3^+ + \text{OH}^-$	$3.2 \times 10^{-5}$
Etilamina	$\text{C}_2\text{H}_5\text{NH}_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{C}_2\text{H}_5\text{NH}_3^+ + \text{OH}^-$	$5.6 \times 10^{-4}$
Trietanolamina	$(\text{HOC}_2\text{H}_2)_3\text{N} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow (\text{HOC}_2\text{H}_2)_3\text{NH}^+ + \text{OH}^-$	$5.9 \times 10^{-7}$
Trietilamina	$(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{N} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow (\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{NH}^+ + \text{OH}^-$	$5.3 \times 10^{-4}$
Trimetilamina	$(\text{CH}_3)_3\text{N} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow (\text{CH}_3)_3\text{NH}^+ + \text{OH}^-$	$5.3 \times 10^{-5}$
Yoduro (ion)	$\text{I}^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{HI} + \text{OH}^-$	Muy pequeño

K<sub>h</sub> = Constante de hidrólisis



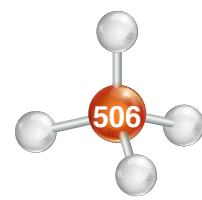


**Constantes del producto de solubilidad (K<sub>ps</sub>) (298.15 K y a nivel del mar) [3, 4]**

Anión	Ecuación de equilibrio	K <sub>ps</sub>
Acetato	$\text{AgC}_2\text{H}_3\text{O}_2 \leftrightarrow \text{Ag}^+ + \text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2^-$	$4.0 \times 10^{-3}$
	$\text{Hg}_2(\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2)_2 \leftrightarrow \text{Hg}_2^{2+} + 2\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2^-$	$3.6 \times 10^{-10}$
Arsenato (orto)	$\text{Ag}_3\text{AsO}_4 \leftrightarrow 3\text{Ag}^+ + \text{AsO}_4^{3-}$	$1.0 \times 10^{-22}$
	$\text{AlAsO}_4 \leftrightarrow \text{Al}^{3+} + \text{AsO}_4^{3-}$	$1.6 \times 10^{-16}$
	$\text{Ba}_3(\text{AsO}_4)_2 \leftrightarrow 3\text{Ba}^{2+} + 2\text{AsO}_4^{3-}$	$1.1 \times 10^{-13}$
	$\text{Ca}_3(\text{AsO}_4)_2 \leftrightarrow 3\text{Ca}^{2+} + 2\text{AsO}_4^{3-}$	$6.8 \times 10^{-19}$
	$\text{Cd}_3(\text{AsO}_4)_2 \leftrightarrow 3\text{Cd}^{2+} + 2\text{AsO}_4^{3-}$	$2.2 \times 10^{-33}$
	$\text{CrAsO}_4 \leftrightarrow \text{Cr}^{3+} + \text{AsO}_4^{3-}$	$7.8 \times 10^{-21}$
	$\text{Cu}_3(\text{AsO}_4)_2 \leftrightarrow 3\text{Cu}^{2+} + 2\text{AsO}_4^{3-}$	$7.6 \times 10^{-36}$
	$\text{FeAsO}_4 \leftrightarrow \text{Fe}^{3+} + \text{AsO}_4^{3-}$	$5.8 \times 10^{-21}$
	$\text{Pb}_3(\text{AsO}_4)_2 \leftrightarrow 3\text{Pb}^{2+} + 2\text{AsO}_4^{3-}$	$4.1 \times 10^{-36}$
	$\text{Mg}_3(\text{AsO}_4)_2 \leftrightarrow 3\text{Mg}^{2+} + 2\text{AsO}_4^{3-}$	$2.1 \times 10^{-20}$
	$\text{Mn}_3(\text{AsO}_4)_2 \leftrightarrow 3\text{Mn}^{2+} + 2\text{AsO}_4^{3-}$	$1.9 \times 10^{-29}$
	$\text{Ni}_3(\text{AsO}_4)_2 \leftrightarrow 3\text{Ni}^{2+} + 2\text{AsO}_4^{3-}$	$3.1 \times 10^{-26}$
$\text{Zn}_3(\text{AsO}_4)_2 \leftrightarrow 3\text{Zn}^{2+} + 2\text{AsO}_4^{3-}$	$1.1 \times 10^{-27}$	
Bromato	$\text{AgBrO}_3 \leftrightarrow \text{Ag}^+ + \text{BrO}_3^-$	$6.0 \times 10^{-5}$
	$\text{Ba}(\text{BrO}_3)_2 \leftrightarrow \text{Ba}^{2+} + 2\text{BrO}_3^-$	$5.5 \times 10^{-6}$
Bromuro	$\text{CuBr} \leftrightarrow \text{Cu}^+ + \text{Br}^-$	$5.3 \times 10^{-9}$
	$\text{PbBr}_2 \leftrightarrow \text{Pb}^{2+} + 2\text{Br}^-$	$4.6 \times 10^{-6}$
	$\text{Hg}_2\text{Br}_2 \leftrightarrow \text{Hg}_2^{2+} + 2\text{Br}^-$	$1.3 \times 10^{-22}$
	$\text{HgBr}_2 \leftrightarrow \text{Hg}^{2+} + 2\text{Br}^-$	$1.1 \times 10^{-19}$
	$\text{AgBr} \leftrightarrow \text{Ag}^+ + \text{Br}^-$	$5.2 \times 10^{-13}$
	$\text{TlBr} \leftrightarrow \text{Tl}^+ + \text{Br}^-$	$3.9 \times 10^{-6}$
Carbonato	$\text{BaCO}_3 \leftrightarrow \text{Ba}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	$5.1 \times 10^{-9}$
	$\text{CdCO}_3 \leftrightarrow \text{Cd}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	$5.2 \times 10^{-12}$
	$\text{CaCO}_3 \leftrightarrow \text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	$4.7 \times 10^{-9}$
	$\text{CoCO}_3 \leftrightarrow \text{Co}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	$8.0 \times 10^{-13}$
	$\text{CuCO}_3 \leftrightarrow \text{Cu}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	$2.5 \times 10^{-10}$
	$\text{FeCO}_3 \leftrightarrow \text{Fe}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	$3.5 \times 10^{-11}$
	$\text{Li}_2\text{CO}_3 \leftrightarrow 2\text{Li}^+ + \text{CO}_3^{2-}$	$3.1 \times 10^{-1}$
	$\text{PbCO}_3 \leftrightarrow \text{Pb}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	$1.5 \times 10^{-13}$
	$\text{MgCO}_3 \leftrightarrow \text{Mg}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	$2.1 \times 10^{-20}$
	$\text{MnCO}_3 \leftrightarrow \text{Mn}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	$8.8 \times 10^{-11}$
	$\text{NiCO}_3 \leftrightarrow \text{Ni}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	$1.4 \times 10^{-7}$
	$\text{Hg}_2\text{CO}_3 \leftrightarrow \text{Hg}_2^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	$8.9 \times 10^{-17}$
	$\text{Ag}_2\text{CO}_3 \leftrightarrow 2\text{Ag}^+ + \text{CO}_3^{2-}$	$8.2 \times 10^{-12}$

Anión	Ecuación de equilibrio	K <sub>ps</sub>
	$\text{SrCO}_3 \leftrightarrow \text{Sr}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	$7.0 \times 10^{-10}$
	$\text{Tl}_2\text{CO}_3 \leftrightarrow 2\text{Tl}^+ + \text{CO}_3^{2-}$	$4.0 \times 10^{-3}$
	$\text{ZnCO}_3 \leftrightarrow \text{Zn}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	$2.0 \times 10^{-10}$
Cianuro	$\text{BiOCl} \leftrightarrow \text{BiO}^+ + \text{Cl}^-$	$7.9 \times 10^{-9}$
	$\text{CuCl} \leftrightarrow \text{Cu}^+ + \text{Cl}^-$	$3.2 \times 10^{-7}$
	$\text{PbCl}_2 \leftrightarrow \text{Pb}^{2+} + 2\text{Cl}^-$	$1.6 \times 10^{-5}$
Cloruro	$\text{Hg}_2\text{Cl}_2 \leftrightarrow \text{Hg}_2^{2+} + 2\text{Cl}^-$	$1.1 \times 10^{-18}$
	$\text{HgCl}_2 \leftrightarrow \text{Hg}^{2+} + 2\text{Cl}^-$	$6.1 \times 10^{-15}$
	$\text{AgCl} \leftrightarrow \text{Ag}^+ + \text{Cl}^-$	$2.8 \times 10^{-10}$
	$\text{TlCl} \leftrightarrow \text{Tl}^+ + \text{Cl}^-$	$1.8 \times 10^{-4}$
	$\text{BaCrO}_4 \leftrightarrow \text{Ba}^{2+} + \text{CrO}_4^{2-}$	$8.5 \times 10^{-11}$
	$\text{CaCrO}_4 \leftrightarrow \text{Ca}^{2+} + \text{CrO}_4^{2-}$	$7.1 \times 10^{-4}$
Cromato	$\text{CuCrO}_4 \leftrightarrow \text{Cu}^{2+} + \text{CrO}_4^{2-}$	$3.6 \times 10^{-6}$
	$\text{PbCrO}_4 \leftrightarrow \text{Pb}^{2+} + \text{CrO}_4^{2-}$	$2.0 \times 10^{-16}$
	$\text{Hg}_2\text{CrO}_4 \leftrightarrow \text{Hg}_2^{2+} + \text{CrO}_4^{2-}$	$2.0 \times 10^{-9}$
	$\text{Ag}_2\text{CrO}_4 \leftrightarrow 2\text{Ag}^+ + \text{CrO}_4^{2-}$	$1.9 \times 10^{-12}$
	$\text{SrCrO}_4 \leftrightarrow \text{Sr}^{2+} + \text{CrO}_4^{2-}$	$3.6 \times 10^{-6}$
	$\text{Ti}_2\text{CrO}_4 \leftrightarrow 2\text{Ti}^+ + \text{CrO}_4^{2-}$	$9.8 \times 10^{-13}$
Fluoruro	$\text{CuCN} \leftrightarrow \text{Cu}^+ + \text{CN}^-$	$1.0 \times 10^{-11}$
	$\text{Hg}_2(\text{CN})_2 \leftrightarrow \text{Hg}_2^{2+} + 2\text{CN}^-$	$5.0 \times 10^{-4}$
	$\text{AgCN} \leftrightarrow \text{Ag}^+ + \text{CN}^-$	$1.6 \times 10^{-14}$
	$\text{BaF}_2 \leftrightarrow \text{Ba}^{2+} + 2\text{F}^-$	$2.4 \times 10^{-5}$
	$\text{CaF}_2 \leftrightarrow \text{Ca}^{2+} + 2\text{F}^-$	$1.7 \times 10^{-10}$
	$\text{LiF} \leftrightarrow \text{Li}^+ + \text{F}^-$	$5.0 \times 10^{-3}$
Fosfato	$\text{PbF}_2 \leftrightarrow \text{Pb}^{2+} + 2\text{F}^-$	$4.0 \times 10^{-8}$
	$\text{MgF}_2 \leftrightarrow \text{Mg}^{2+} + 2\text{F}^-$	$8.0 \times 10^{-8}$
	$\text{SrF}_2 \leftrightarrow \text{Sr}^{2+} + 2\text{F}^-$	$7.9 \times 10^{-10}$
	$\text{ThF}_4 \leftrightarrow \text{Th}^{4+} + 4\text{F}^-$	$4.0 \times 10^{-28}$
	$\text{AlPO}_4 \leftrightarrow \text{Al}^{3+} + \text{PO}_4^{3-}$	$5.8 \times 10^{-19}$
	$\text{Ba}_3(\text{PO}_4)_2 \leftrightarrow 3\text{Ba}^{2+} + 2\text{PO}_4^{3-}$	$6.0 \times 10^{-39}$
	$\text{BiPO}_4 \leftrightarrow \text{Bi}^{3+} + \text{PO}_4^{3-}$	$1.0 \times 10^{-20}$
	$\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2 \leftrightarrow 3\text{Ca}^{2+} + 2\text{PO}_4^{3-}$	$1.3 \times 10^{-32}$
	$\text{FePO}_4 \leftrightarrow \text{Fe}^{3+} + \text{PO}_4^{3-}$	$1.5 \times 10^{-18}$
	$\text{Pb}_3(\text{PO}_4)_2 \leftrightarrow 3\text{Pb}^{2+} + 2\text{PO}_4^{3-}$	$8.0 \times 10^{-43}$
	$\text{Li}_3\text{PO}_4 \leftrightarrow 3\text{Li}^+ + \text{PO}_4^{3-}$	$3.2 \times 10^{-13}$
	$\text{Mg}_3(\text{PO}_4)_2 \leftrightarrow 3\text{Mg}^{2+} + 2\text{PO}_4^{3-}$	$1.0 \times 10^{-13}$
	$\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \leftrightarrow \text{Mg}^{2+} + \text{NH}_4^+ + \text{PO}_4^{3-}$	$2.6 \times 10^{-13}$

Continúa...

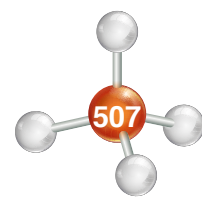




Anión	Ecuación de equilibrio	K <sub>ps</sub>	
	$Mn_3(PO_4)_3 \leftrightarrow 3Mn^{2+} + 2PO_4^{3-}$	$1.0 \times 10^{-22}$	
	$Ag_3PO_4 \leftrightarrow 3Ag^+ + PO_4^{3-}$	$1.0 \times 10^{-21}$	
	$Sr_3(PO_4)_2 \leftrightarrow 3Sr^{2+} + 2PO_4^{3-}$	$1.0 \times 10^{-31}$	
	$Tl_3PO_4 \leftrightarrow 3Tl^+ + PO_4^{3-}$	$6.7 \times 10^{-8}$	
	$Zn_3(PO_4)_2 \leftrightarrow 3Zn^{2+} + 2PO_4^{3-}$	$9.1 \times 10^{-33}$	
Hexacianoferrato (II)	$K_2Zn_3(Fe(CN)_6)_2 \leftrightarrow 2K^+ + 3Zn^{2+} + 2Fe(CN)_6^{4-}$	$1.0 \times 10^{-95}$	
	$Ag_3(Fe(CN)_6) \leftrightarrow 4Ag^+ + Fe(CN)_6^{4-}$	$1.6 \times 10^{-41}$	
Hexacianoferrato (III)	$Ag_3Fe(CN)_6 \leftrightarrow 3Ag^+ + Fe(CN)_6^{3-}$	$1.0 \times 10^{-22}$	
Hidróxido	$Al(OH)_3 \leftrightarrow Al^{3+} + 3OH^-$	$5.0 \times 10^{-33}$	
	$SbOOH \leftrightarrow SbO^+ + OH^-$	$1.0 \times 10^{-17}$	
	$Be(OH)_2 \leftrightarrow Be^{2+} + 2OH^-$	$7.0 \times 10^{-22}$	
	$BiOOH \leftrightarrow BiO^+ + OH^-$	$1.0 \times 10^{-12}$	
	$Cd(OH)_2 \leftrightarrow Cd^{2+} + 2OH^-$	$2.0 \times 10^{-14}$	
	$Ca(OH)_2 \leftrightarrow Ca^{2+} + 2OH^-$	$5.5 \times 10^{-6}$	
	$Ce(OH)_3 \leftrightarrow Ce^{3+} + 3OH^-$	$2.0 \times 10^{-20}$	
	$Cr(OH)_3 \leftrightarrow Cr^{3+} + 3OH^-$	$7.0 \times 10^{-31}$	
	$Cr(OH)_2 \leftrightarrow Cr^{2+} + 2OH^-$	$1.0 \times 10^{-17}$	
	$Co(OH)_3 \leftrightarrow Co^{3+} + 3OH^-$	$1.0 \times 10^{-43}$	
	$Co(OH)_2 \leftrightarrow Co^{2+} + 2OH^-$	$2.5 \times 10^{-16}$	
	$Cu(OH)_2 \leftrightarrow Cu^{2+} + 2OH^-$	$1.6 \times 10^{-19}$	
	$Fe(OH)_3 \leftrightarrow Fe^{3+} + 3OH^-$	$6.0 \times 10^{-38}$	
	$Fe(OH)_2 \leftrightarrow Fe^{2+} + 2OH^-$	$2.0 \times 10^{-15}$	
	$Au(OH)_3 \leftrightarrow Au^{3+} + 3OH^-$	$5.5 \times 10^{-46}$	
	$Pb(OH)_2 \leftrightarrow Pb^{2+} + 2OH^-$	$4.2 \times 10^{-15}$	
	$Mg(OH)_2 \leftrightarrow Mg^{2+} + 2OH^-$	$8.9 \times 10^{-12}$	
	$Mn(OH)_2 \leftrightarrow Mn^{2+} + 2OH^-$	$1.6 \times 10^{-13}$	
	$Mn(OH)_3 \leftrightarrow Mn^{3+} + 3OH^-$	$1.0 \times 10^{-36}$	
	$Hg(OH)_2 \leftrightarrow Hg^{2+} + 2OH^-$	$1.2 \times 10^{-22}$	
	$Ni(OH)_2 \leftrightarrow Ni^{2+} + 2OH^-$	$1.6 \times 10^{-16}$	
	$Pd(OH)_2 \leftrightarrow Pd^{2+} + 2OH^-$	$1.0 \times 10^{-31}$	
	$Pt(OH)_2 \leftrightarrow Pt^{2+} + 2OH^-$	$1.0 \times 10^{-35}$	
	$Ag_2O + H_2O \leftrightarrow 2Ag^+ + 2OH^-$	$2.0 \times 10^{-8}$	
	$Sn(OH)_2 \leftrightarrow Sn^{2+} + 2OH^-$	$3.0 \times 10^{-27}$	
	$Sn(OH)_4 \leftrightarrow Sn^{4+} + 4OH^-$	$\approx 10^{-57}$	
	$TiOH \leftrightarrow Ti^+ + OH^-$	$6.3 \times 10^{-1}$	
	$Zn(OH)_2 \leftrightarrow Zn^{2+} + 2OH^-$	$4.5 \times 10^{-17}$	
	Oxalato	$BaC_2O_4 \leftrightarrow Ba^{2+} + C_2O_4^{2-}$	$1.5 \times 10^{-8}$

Anión	Ecuación de equilibrio	K <sub>ps</sub>	
	$CdC_2O_4 \leftrightarrow Cd^{2+} + C_2O_4^{2-}$	$2.8 \times 10^{-8}$	
	$CaC_2O_4 \leftrightarrow Ca^{2+} + C_2O_4^{2-}$	$2.1 \times 10^{-9}$	
	$CoC_2O_4 \leftrightarrow Co^{2+} + C_2O_4^{2-}$	$4.0 \times 10^{-8}$	
	$CuC_2O_4 \leftrightarrow Cu^{2+} + C_2O_4^{2-}$	$3.0 \times 10^{-8}$	
	$FeC_2O_4 \leftrightarrow Fe^{2+} + C_2O_4^{2-}$	$2.0 \times 10^{-7}$	
	$La_2(C_2O_4)_3 \leftrightarrow 2La^{3+} + 3C_2O_4^{2-}$	$2.0 \times 10^{-28}$	
	$PbC_2O_4 \leftrightarrow Pb^{2+} + C_2O_4^{2-}$	$8.3 \times 10^{-12}$	
	$MgC_2O_4 \leftrightarrow Mg^{2+} + C_2O_4^{2-}$	$8.6 \times 10^{-5}$	
	$Mn_2(C_2O_4)_3 \leftrightarrow 2Mn^{2+} + 3C_2O_4^{2-}$	$7.0 \times 10^{-20}$	
	$MnC_2O_4 \leftrightarrow Mn^{2+} + C_2O_4^{2-}$	$1.0 \times 10^{-15}$	
	$Hg_2C_2O_4 \leftrightarrow Hg_2^{2+} + C_2O_4^{2-}$	$1.0 \times 10^{-13}$	
	$NiC_2O_4 \leftrightarrow Ni^{2+} + C_2O_4^{2-}$	$4.0 \times 10^{-10}$	
	$Ag_2C_2O_4 \leftrightarrow 2Ag^+ + C_2O_4^{2-}$	$1.0 \times 10^{-11}$	
	$SrC_2O_4 \leftrightarrow Sr^{2+} + C_2O_4^{2-}$	$5.6 \times 10^{-8}$	
	$ZnC_2O_4 \leftrightarrow Zn^{2+} + C_2O_4^{2-}$	$1.5 \times 10^{-9}$	
Sulfato	$BaSO_4 \leftrightarrow Ba^{2+} + SO_4^{2-}$	$1.5 \times 10^{-9}$	
	$CaSO_4 \leftrightarrow Ca^{2+} + SO_4^{2-}$	$2.4 \times 10^{-5}$	
	$PbSO_4 \leftrightarrow Pb^{2+} + SO_4^{2-}$	$1.3 \times 10^{-8}$	
	$Hg_2SO_4 \leftrightarrow Hg_2^{2+} + SO_4^{2-}$	$6.8 \times 10^{-7}$	
	$RaSO_4 \leftrightarrow Ra^{2+} + SO_4^{2-}$	$4.3 \times 10^{-11}$	
	$Ag_2SO_4 \leftrightarrow 2Ag^+ + SO_4^{2-}$	$1.7 \times 10^{-5}$	
	$SrSO_4 \leftrightarrow Sr^{2+} + SO_4^{2-}$	$7.6 \times 10^{-7}$	
	$Tl_2SO_4 \leftrightarrow 2Tl^+ + SO_4^{2-}$	$3.6 \times 10^{-4}$	
	Sulfito	$BaSO_3 \leftrightarrow Ba^{2+} + SO_3^{2-}$	$6.0 \times 10^{-5}$
		$CaSO_3 \leftrightarrow Ca^{2+} + SO_3^{2-}$	$1.0 \times 10^{-4}$
$Ag_2SO_3 \leftrightarrow 2Ag^+ + SO_3^{2-}$		$5.0 \times 10^{-14}$	
Sulfuro	$Al_2S_3 \leftrightarrow 2Al^{3+} + 3S^{2-}$	$2.0 \times 10^{-7}$	
	$Bi_2S_3 \leftrightarrow 2Bi^{3+} + 3S^{2-}$	$1.0 \times 10^{-96}$	
	$CdS \leftrightarrow Cd^{2+} + S^{2-}$	$7.0 \times 10^{-27}$	
	$CoS \leftrightarrow Co^{2+} + S^{2-}$	$5.0 \times 10^{-22}$	
	$CuS \leftrightarrow Cu^{2+} + S^{2-}$	$8.0 \times 10^{-36}$	
	$Cu_2S \leftrightarrow 2Cu^+ + S^{2-}$	$1.2 \times 10^{-49}$	
	$Fe_2S_3 \leftrightarrow 2Fe^{3+} + 3S^{2-}$	$1.0 \times 10^{-88}$	
	$FeS \leftrightarrow Fe^{2+} + S^{2-}$	$3.0 \times 10^{-17}$	
	$PbS \leftrightarrow Pb^{2+} + S^{2-}$	$1.3 \times 10^{-28}$	
	$MnS \leftrightarrow Mn^{2+} + S^{2-}$	$1.0 \times 10^{-11}$	
	$HgS \leftrightarrow Hg^{2+} + S^{2-}$	$3.0 \times 10^{-52}$	
	$Hg_2S \leftrightarrow Hg_2^{2+} + S^{2-}$	$3.0 \times 10^{-20}$	
	$NiS \leftrightarrow Ni^{2+} + S^{2-}$	$2.0 \times 10^{-22}$	

Continúa...





Anión	Ecuación de equilibrio	K <sub>ps</sub>
	$\text{Ag}_2\text{S} \leftrightarrow 2\text{Ag}^+ + \text{S}^{2-}$	$8.0 \times 10^{-50}$
	$\text{Tl}_2\text{S} \leftrightarrow 2\text{Tl}^+ + \text{S}^{2-}$	$1.2 \times 10^{-24}$
	$\text{SnS}_2 \leftrightarrow \text{Sn}^{4+} + 2\text{S}^{2-}$	$1.0 \times 10^{-70}$
	$\text{SnS} \leftrightarrow \text{Sn}^{2+} + \text{S}^{2-}$	$1.3 \times 10^{-27}$
	$\text{ZnS} \leftrightarrow \text{Zn}^{2+} + \text{S}^{2-}$	$1.6 \times 10^{-23}$
Tiocianato	$\text{CuSCN} \leftrightarrow \text{Cu}^+ + \text{SCN}^-$	$4.0 \times 10^{-14}$
	$\text{Hg}_2(\text{SCN})_2 \leftrightarrow \text{Hg}_2^{2+} + 2\text{SCN}^-$	$3.0 \times 10^{-20}$
	$\text{AgSCN} \leftrightarrow \text{Ag}^+ + \text{SCN}^-$	$1.0 \times 10^{-12}$
Tiosulfato	$\text{BaS}_2\text{O}_3 \leftrightarrow \text{Ba}^{2+} + \text{S}_2\text{O}_3^{2-}$	$6.0 \times 10^{-5}$
Yodato	$\text{Ba}(\text{IO}_3)_2 \leftrightarrow \text{Ba}^{2+} + 2\text{IO}_3^-$	$1.3 \times 10^{-9}$
	$\text{Ca}(\text{IO}_3)_2 \leftrightarrow \text{Ca}^{2+} + 2\text{IO}_3^-$	$6.0 \times 10^{-7}$
	$\text{Ce}(\text{IO}_3)_3 \leftrightarrow \text{Ce}^{3+} + 3\text{IO}_3^-$	$3.2 \times 10^{-10}$
	$\text{Cu}(\text{IO}_3)_2 \leftrightarrow \text{Cu}^{2+} + 2\text{IO}_3^-$	$3.0 \times 10^{-8}$
	$\text{Pb}(\text{IO}_3)_2 \leftrightarrow \text{Pb}^{2+} + 2\text{IO}_3^-$	$2.6 \times 10^{-13}$

Anión	Ecuación de equilibrio	K <sub>ps</sub>
	$\text{Hg}(\text{IO}_3)_2 \leftrightarrow \text{Hg}^{2+} + 2\text{IO}_3^-$	$3.0 \times 10^{-13}$
	$\text{Hg}_2(\text{IO}_3)_2 \leftrightarrow \text{Hg}_2^{2+} + 2\text{IO}_3^-$	$2.5 \times 10^{-14}$
	$\text{Ni}(\text{IO}_3)_2 \leftrightarrow \text{Ni}^{2+} + 2\text{IO}_3^-$	$1.4 \times 10^{-8}$
	$\text{AgIO}_3 \leftrightarrow \text{Ag}^+ + \text{IO}_3^-$	$3.0 \times 10^{-8}$
	$\text{Sr}(\text{IO}_3)_2 \leftrightarrow \text{Sr}^{2+} + 2\text{IO}_3^-$	$3.3 \times 10^{-7}$
	$\text{TlIO}_3 \leftrightarrow \text{Tl}^+ + \text{IO}_3^-$	$3.0 \times 10^{-6}$
	$\text{Zn}(\text{IO}_3)_2 \leftrightarrow \text{Zn}^{2+} + 2\text{IO}_3^-$	$2.0 \times 10^{-8}$
Yoduro	$\text{CuI} \leftrightarrow \text{Cu}^+ + \text{I}^-$	$1.0 \times 10^{-12}$
	$\text{PbI}_2 \leftrightarrow \text{Pb}^{2+} + 2\text{I}^-$	$8.3 \times 10^{-9}$
	$\text{HgI}_2 \leftrightarrow \text{Hg}^{2+} + 2\text{I}^-$	$2.5 \times 10^{-26}$
	$\text{Hg}_2\text{I}_2 \leftrightarrow \text{Hg}_2^{2+} + 2\text{I}^-$	$4.5 \times 10^{-29}$
	$\text{AgI} \leftrightarrow \text{Ag}^+ + \text{I}^-$	$8.5 \times 10^{-17}$
	$\text{TlI} \leftrightarrow \text{Tl}^+ + \text{I}^-$	$6.5 \times 10^{-8}$



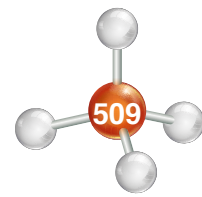


Potenciales estándares de reducción ( $E^\circ$  a 298.15 K) [3, 4]

Media – reacción	$E^\circ$ (V)
$\text{Li}^+ + e \rightarrow \text{Li}^0$	-3.05
$\text{Ca}(\text{OH})_2 + 2e \rightarrow \text{Ca}^0 + 2\text{OH}^-$	-3.03
$\text{Ba}(\text{OH})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{Ba}^0 + 8\text{H}_2\text{O} + 2\text{OH}^-$	-2.97
$\text{Rb}^+ + e \rightarrow \text{Rb}^0$	-2.93
$\text{K}^+ + e \rightarrow \text{K}^0$	-2.93
$\text{Cs}^+ + e \rightarrow \text{Cs}^0$	-2.92
$\text{Ba}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Ba}^0$	-2.90
$\text{Sr}^{2+} + 2e$	-2.89
$\text{Ca}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Ca}^0$	-2.87
$\text{Na}^+ + e \rightarrow \text{Na}^0$	-2.71
$\text{Mg}(\text{OH})_2 + 2e \rightarrow \text{Mg}^0 + 2\text{OH}^-$	-2.69
$\text{Mg}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Mg}^0$	-2.37
$\text{H}_2\text{AlO}_3^- + \text{H}_2\text{O} + 3e \rightarrow \text{Al}^0 + 4\text{OH}^-$	-2.35
$\text{H}_2 + 2e \rightarrow 2\text{H}^-$	-2.25
$\text{Be}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Be}^0$	-1.85
$\text{Al}^{3+} + 3e \rightarrow \text{Al}^0$	-1.66
$\text{Mn}(\text{OH})_2 + 2e \rightarrow \text{Mn}^0 + 2\text{OH}^-$	-1.55
$\text{Cr}(\text{OH})_3 + 3e \rightarrow \text{Cr}^0 + 3\text{OH}^-$	-1.30
$\text{Zn}(\text{CN})_4^{2-} + 2e \rightarrow \text{Zn}^0 + 4\text{CN}^-$	-1.26
$\text{Zn}(\text{OH})_2 + 2e \rightarrow \text{Zn}^0 + 2\text{OH}^-$	-1.25
$\text{ZnO}_2^{2-} + 2\text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{Zn}^0 + 4\text{OH}^-$	-1.22
$\text{CrO}_2^- + 2\text{H}_2\text{O} + 3e \rightarrow \text{Cr}^0 + 4\text{OH}^-$	-1.20
$\text{Mn}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Mn}^0$	-1.18
$\text{V}^{2+} + 2e \rightarrow \text{V}^0$	-1.18
$\text{S}^0 + \text{Hg}^{2+} + 2e \rightarrow \text{HgS}$	-1.15
$2\text{SO}_3^{2-} + 2\text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{S}_2\text{O}_4^{2-} + 4\text{OH}^-$	-1.12
$\text{Cd}(\text{CN})_4^{2-} + 2e \rightarrow \text{Cd}^0 + 4\text{CN}^-$	-1.03
$\text{Zn}(\text{NH}_3)_4^{2+} + 2e \rightarrow \text{Zn}^0 + 4\text{NH}_3$	-1.03
$\text{SO}_4^{2-} + \text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{SO}_3^{2-} + 2\text{OH}^-$	-0.93
$\text{Se} + 2e \rightarrow \text{Se}^{2-}$	-0.92
$\text{HSnO}_2^- + \text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{Sn}^0 + 3\text{OH}^-$	-0.91
$\text{Cr}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Cr}^0$	-0.91
$\text{Sn}(\text{OH})_6^{2-} + 2e \rightarrow \text{HSnO}_2^- + \text{H}_2\text{O} + 3\text{OH}^-$	-0.90
$\text{Fe}(\text{OH})_2 + 2e \rightarrow \text{Fe}^0 + 2\text{OH}^-$	-0.88
$2\text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{H}_2^0 + 2\text{OH}^-$ (1M $\text{OH}^-$ )	-0.83
$\text{Cd}(\text{OH})_2 + 2e \rightarrow \text{Cd}^0 + 2\text{OH}^-$	-0.81
$\text{Zn}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Zn}^0$	-0.76
$\text{Cr}^{3+} + 3e \rightarrow \text{Cr}^0$	-0.74
$\text{Co}(\text{OH})_2 + 2e \rightarrow \text{Co}^0 + 2\text{OH}^-$	-0.73
$\text{Ni}(\text{OH})_2 + 2e \rightarrow \text{Ni}^0 + 2\text{OH}^-$	-0.72
$\text{Ag}_2\text{S} + 2e \rightarrow 2\text{Ag}^0 + \text{S}^{2-}$	-0.69
$\text{TlBr} + e \rightarrow \text{Tl}^0 + \text{Br}$	-0.66
$\text{Au}(\text{CN})_2^- + e \rightarrow \text{Au}^0 + 2\text{CN}^-$	-0.60

Media – reacción	$E^\circ$ (V)
$2\text{SO}_3^{2-} + 3\text{H}_2\text{O} + 4e \rightarrow \text{S}_2\text{O}_3^{2-} + 6\text{OH}^-$	-0.58
$\text{Fe}(\text{OH})_3 + e \rightarrow \text{Fe}(\text{OH})_2 + \text{OH}^-$	-0.56
$\text{TlCl} + e \rightarrow \text{Tl}^0 + \text{Cl}^-$	-0.56
$\text{H}_3\text{PO}_3 + 2\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow \text{H}_3\text{PO}_2 + 3\text{H}_2\text{O}$	-0.50
$\text{S}^0 + 2e \rightarrow \text{S}^{2-}$	-0.48
$\text{Bi}_2\text{O}_3 + 3\text{H}_2\text{O} + 6e \rightarrow 2\text{Bi}^0 + 6\text{OH}^-$	-0.44
$\text{Fe}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Fe}^0$	-0.44
$\text{Cr}^{3+} + e \rightarrow \text{Cr}^{++}$	-0.41
$2\text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{H}_2 + 2\text{OH}^-$ ( $10^{-7} \text{OH}^-$ , $10^{-7} \text{H}_3\text{O}^+$ )	-0.41
$\text{Cd}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Cd}^0$	-0.40
$2\text{H}_3\text{O}^+ + \text{Se}^0 + 2e \rightarrow \text{H}_2\text{Se} + 2\text{H}_2\text{O}$	-0.40
$\text{Mn}(\text{OH})_3 + e \rightarrow \text{Mn}(\text{OH})_2 + \text{OH}^-$	-0.40
$\text{PbI}_2 + 2e \rightarrow \text{Pb}^0 + 2\text{I}^-$	-0.37
$\text{PbSO}_4 + 2e \rightarrow \text{Pb}^0 + \text{SO}_4^{2-}$	-0.36
$\text{Tl}^+ + e \rightarrow \text{Tl}$	-0.34
$\text{Ag}(\text{CN})_2^- + e \rightarrow \text{Ag}^0 + 2\text{CN}^-$	-0.31
$\text{PbBr}_2 + 2e \rightarrow \text{Pb}^0 + 2\text{Br}^-$	-0.28
$\text{Co}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Co}^0$	-0.28
$\text{H}_3\text{PO}_4 + 2\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow \text{H}_3\text{PO}_3 + 3\text{H}_2\text{O}$	-0.28
$\text{PbCl}_2 + 2e \rightarrow \text{Pb}^0 + 2\text{Cl}^-$	-0.27
$\text{V}^{3+} + e \rightarrow \text{V}^{2+}$	-0.26
$\text{Ni}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Ni}^0$	-0.25
$2\text{SO}_4^{2-} + 4\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow \text{S}_2\text{O}_6^{2-} + 6\text{H}_2\text{O}$	-0.22
$\text{CO}_2 + 2\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow \text{HCOOH} + 2\text{H}_2\text{O}$	-0.20
$\text{CuI} + e \rightarrow \text{Cu}^0 + \text{I}^-$	-0.19
$\text{AgI} + e \rightarrow \text{Ag}^0 + \text{I}^-$	-0.15
$\text{Sn}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Sn}^0$	-0.14
$\text{CrO}_4^{2-} + 4\text{H}_2\text{O} + 3e \rightarrow \text{Cr}(\text{OH})_3 + 5\text{OH}^-$	-0.13
$\text{Pb}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Pb}^0$	-0.13
$\text{Cu}(\text{NH}_3)_2^+ + e \rightarrow \text{Cu}^0 + 2\text{NH}_3$	-0.12
$\text{NO}_3^- + 6\text{H}_2\text{O} + 8e \rightarrow \text{NH}_3 + 9\text{OH}^-$	-0.12
$\text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{HO}_2^- + \text{OH}^-$	-0.08
$\text{MnO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{Mn}(\text{OH})_2 + 2\text{OH}^-$	-0.05
$2\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow \text{H}_2^0 + 2\text{H}_2\text{O}$ (1M $\text{H}_3\text{O}^+$ )	0.00
$\text{NO}_3^- + \text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{NO}_2^- + 2\text{OH}^-$	+0.01
$\text{Ag}(\text{S}_2\text{O}_3)_2^{3-} + e \rightarrow \text{Ag}^0 + 2\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$	-0.02
$\text{CuBr} + e \rightarrow \text{Cu}^0 + \text{Br}$	+0.03
$\text{HCOOH}(\text{aq}) + 2\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow 3\text{H}_2\text{O} + \text{HCHO}(\text{aq})$	+0.06
$\text{S}_4\text{O}_6^{2-} + 2e \rightarrow 2\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$	+0.08
$\text{AgBr} + e \rightarrow \text{Ag}^0 + \text{Br}$	+0.10
$\text{Mn}(\text{OH})_3 + e \rightarrow \text{Mn}(\text{OH})_2 + \text{OH}^-$	+0.10

Continúa...





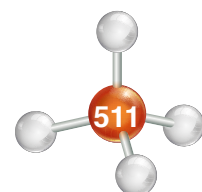
Media - reacción	E° (V)
$\text{CuCl} + e \rightarrow \text{Cu} + \text{Cl}^-$	+0.14
$\text{SO}_4^{2-} + 8\text{H}_3\text{O}^+ + 8e \rightarrow \text{S}^{2-} + 12\text{H}_2\text{O}$	+0.14
$2\text{H}_3\text{O}^+ + \text{S} + 2e \rightarrow \text{H}_2\text{S} + 2\text{H}_2\text{O}$	+0.14
$\text{Sn}^{4+} + 2e \rightarrow \text{Sn}^{2+}$	+0.15
$\text{Cu}^{2+} + e \rightarrow \text{Cu}^+$	+0.15
$\text{SO}_4^{2-} + 4\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow \text{H}_2\text{SO}_3 + 5\text{H}_2\text{O}$	+0.17
$\text{Co}(\text{OH})_3 + e \rightarrow \text{Co}(\text{OH})_2 + \text{OH}^-$	+0.17
$\text{HCHO}(\text{aq}) + 2\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow \text{CH}_3\text{OH} + 2\text{H}_2\text{O}$	+0.19
$\text{AgCl} + e \rightarrow \text{Ag}^0 + \text{Cl}^-$	+0.22
$\text{PbO}_2 + \text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{PbO} + 2\text{OH}^-$	+0.25
$\text{IO}_3^- + 3\text{H}_2\text{O} + 6e \rightarrow \text{I}^- + 6\text{OH}^-$	+0.26
$\text{BiO}^+ + 2\text{H}_3\text{O}^+ + 3e \rightarrow \text{Bi}^0 + 3\text{H}_2\text{O}$	+0.32
$\text{Hg}_2\text{Cl}_2 + 2e + 2\text{Hg}^0 + 2\text{Cl}^-$	+0.33
$\text{Cu}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Cu}^0$	+0.34
$\text{Ag}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow 2\text{Ag} + 2\text{OH}^-$	+0.34
$\text{ClO}_4^- + \text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{ClO}_3^- + 2\text{OH}^-$	+0.36
$\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+ + e \rightarrow \text{Ag}^0 + 2\text{NH}_3$	+0.37
$2\text{H}_2\text{SO}_3 + 2\text{H}_3\text{O}^+ + 4e \rightarrow \text{S}_2\text{O}_3^{2-} + 5\text{H}_2\text{O}$	+0.40
$\text{O}_2 + 2\text{H}_2\text{O} + 4e \rightarrow 4\text{OH}^-$ (1M OH <sup>-</sup> )	+0.40
$\text{AgCrO}_4 + 2e \rightarrow \text{Ag}^0 + \text{CrO}_4^{2-}$	+0.45
$\text{NiO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{Ni}(\text{OH})_2 + 2\text{OH}^-$	+0.49
$\text{IO}^- + \text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{I}^- + 2\text{OH}^-$	+0.49
$\text{Cu}^+ + e \rightarrow \text{Cu}^0$	+0.52
$\text{I}_2 + 2e \rightarrow 2\text{I}^-$	+0.54
$\text{I}_3^- + 2e \rightarrow 3\text{I}^-$	+0.54
$\text{Cu}^{2+} + \text{Cl}^- + e \rightarrow \text{CuCl}$	+0.54
$\text{AgBrO}_3 + e \rightarrow \text{Ag}^0 + \text{BrO}_3^-$	+0.55
$\text{H}_3\text{AsO}_4 + 2\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow \text{H}_3\text{AsO}_3 + 3\text{H}_2\text{O}$	+0.56
$\text{MnO}_4^- + e \rightarrow \text{MnO}_4^{2-}$	+0.56
$\text{MnO}_4^{2-} + 2\text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{MnO}_2 + 4\text{OH}^-$	+0.60
$\text{BrO}_3^- + 3\text{H}_2\text{O} + 6e \rightarrow \text{Br}^- + 6\text{OH}^-$	+0.61
$\text{ClO}_3^- + 3\text{H}_2\text{O} + 6e \rightarrow \text{Cl}^- + 6\text{OH}^-$	+0.62
$\text{Cu}^{2+} + \text{Br}^- + e \rightarrow \text{CuBr}$	+0.64
$\text{O}_2 + 2\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$	+0.68
$\text{BrO}^- + \text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{Br}^- + 2\text{OH}^-$	+0.76
$\text{Fe}^{3+} + e \rightarrow \text{Fe}^{2+}$	+0.77
$\text{Hg}_2^{2+} + 2e \rightarrow 2\text{Hg}^0$	+0.79
$\text{Ag}^+ + e \rightarrow \text{Ag}^0$	+0.80
$2\text{NO}_3^- + 4\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow 2\text{NO}_2(\text{N}_2\text{O}_4) + 6\text{H}_2\text{O}$	+0.80
$\text{O}_2 + 4\text{H}_3\text{O}^+ + 4e \rightarrow 6\text{H}_2\text{O}$ ( $10^{-7} \text{H}_3\text{O}^+$ , $10^{-7} \text{OH}^-$ )	+0.82
$\text{NO}_3^- + 10\text{H}_3\text{O}^+ + 8e \rightarrow \text{NH}_4^+ + 13\text{H}_2\text{O}$	+0.84

Media - reacción	E° (V)
$\text{Hg}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Hg}^0$	+0.85
$\text{Cu}^{2+} + \text{I}^- + e \rightarrow \text{CuI}$	+0.86
$\text{HO}_2^- + \text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow 3\text{OH}^-$	+0.88
$\text{ClO}^- + \text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{Cl}^- + 2\text{OH}^-$	+0.89
$2\text{Hg}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Hg}_2^{2+}$	+0.92
$\text{NO}_3^- + 3\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow \text{HNO}_2 + 4\text{H}_2\text{O}$	+0.94
$\text{NO}_3^- + 4\text{H}_3\text{O}^+ + 3e \rightarrow \text{NO} + 6\text{H}_2\text{O}$	+0.96
$\text{AuCl}_4^- + 3e \rightarrow \text{Au}^0 + 4\text{Cl}^-$	+0.99
$\text{HNO}_2 + \text{H}_3\text{O}^+ + e \rightarrow \text{NO} + 2\text{H}_2\text{O}$	+1.00
$\text{VO}_2^+ + 2\text{H}_3\text{O}^+ + e \rightarrow \text{VO}^{2+} + 3\text{H}_2\text{O}$	+1.00
$\text{Br}_2 + 2e \rightarrow 2\text{Br}^-$	+1.07
$\text{NO}_2 + \text{H}_3\text{O}^+ + e \rightarrow \text{HNO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	+1.07
$\text{SeO}_4^{2-} + 4\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow \text{H}_2\text{SeO}_3 + 5\text{H}_2\text{O}$	+1.15
$\text{ClO}_4^- + 2\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow \text{ClO}_3^- + 3\text{H}_2\text{O}$	+1.19
$\text{IO}_3^- + 6\text{H}_3\text{O}^+ + 5e \rightarrow \frac{1}{2}\text{I}_2 + 9\text{H}_2\text{O}$	+1.20
$\text{ClO}_3^- + 3\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow 4\text{H}_2\text{O} + \text{HClO}_2$	+1.21
$\text{O}_2 + 4\text{H}_3\text{O}^+ + 4e \rightarrow 6\text{H}_2\text{O}$ (1M H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> )	+1.23
$\text{MnO}_2 + 4\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow 6\text{H}_2\text{O} + \text{Mn}^{2+}$	+1.23
$\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} + 14\text{H}_3\text{O}^+ + 6e \rightarrow 2\text{Cr}^{3+} + 21\text{H}_2\text{O}$	+1.33
$\text{Cl}_2 + 2e \rightarrow 2\text{Cl}^-$	+1.36
$\text{HIO} + \text{H}_3\text{O}^+ + e \rightarrow \frac{1}{2}\text{I}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$	+1.45
$\text{PbO}_2 + 4\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow \text{Pb}^{2+} + 6\text{H}_2\text{O}$	+1.46
$2\text{ClO}_3^- + 12\text{H}_3\text{O}^+ + 10e \rightarrow \text{Cl}_2 + 18\text{H}_2\text{O}$	+1.47
$\text{Au}^{3+} + 3e \rightarrow \text{Au}^0$	+1.50
$\text{Mn}^{3+} + e \rightarrow \text{Mn}^{2+}$	+1.51
$\text{MnO}_4^- + 8\text{H}_3\text{O}^+ + 5e \rightarrow \text{Mn}^{2+} + 12\text{H}_2\text{O}$	+1.51
$\text{BrO}_3^- + 6\text{H}_3\text{O}^+ + 5e \rightarrow \frac{1}{2}\text{Br}_2 + 9\text{H}_2\text{O}$	+1.52
$\text{HBrO} + \text{H}_3\text{O}^+ + e \rightarrow \frac{1}{2}\text{Br}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$	+1.59
$\text{Ce}^{4+} + e \rightarrow \text{Ce}^{3+}$	+1.61
$\text{Ti}^{2+} + 2e \rightarrow \text{Ti}^0$	+1.63
$\text{HClO} + \text{H}_3\text{O}^+ + e \rightarrow \frac{1}{2}\text{Cl}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$	+1.63
$\text{NiO}_2 + 4\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow \text{Ni}^{2+} + 6\text{H}_2\text{O}$	+1.68
$\text{PbO}_2 + \text{SO}_4^{2-} + 4\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow \text{PbSO}_4 + 6\text{H}_2\text{O}$	+1.69
$\text{MnO}_4^- + 4\text{H}_3\text{O}^+ + 3e \rightarrow \text{MnO}_2 + 6\text{H}_2\text{O}$	+1.70
$\text{H}_2\text{O}_2 + 2\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow 4\text{H}_2\text{O}$	+1.77
$\text{Co}^{3+} + e \rightarrow \text{Co}^{2+}$	+1.82
$\text{Ag}^{2+} + e \rightarrow \text{Ag}^+$	+1.98
$\text{S}_2\text{O}_8^{2-} + 2e \rightarrow 2\text{SO}_4^{2-}$	+2.01
$\text{O}_3 + 2\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow \text{O}_2 + 3\text{H}_2\text{O}$	+2.07
$\text{F}_2 + 2e \rightarrow 2\text{F}^-$	+2.65
$\text{F}_2 + 2\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightarrow 2\text{HF} + 2\text{H}_2\text{O}$	+3.06



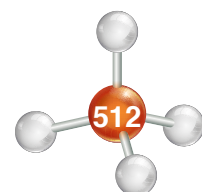
Datos termodinámicos a 298.15 [K] [3, 4, 11]

Especie química		$\Delta H_f^\circ$ [kJ/mol]	$S^\circ$ [J/mol K]	$\Delta G_f^\circ$ [kJ/mol]	
<b>Aluminio</b>	Al(s)	0.00	28.30	0.00	
	AlCl <sub>3</sub> (s)	-704.20	110.70	-628.90	
	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (s)	-1676.00	50.92	-1582.00	
	AlPO <sub>4</sub> (s)	-1733.80	90.76	-1617.90	
	Al <sub>2</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> (s)	-3440.84	239.30	-3099.94	
<b>Antimonio</b>	Sb(s)	0.00	45.69	0.00	
	Sb <sub>4</sub> O <sub>6</sub> (s)	-1417.10	246.00	-1253.00	
	Sb <sub>2</sub> O <sub>5</sub> (s)	-971.90	125.10	-829.20	
	SbCl <sub>5</sub> (l)	-440.20	301.00	-350.10	
	SbCl <sub>3</sub> (s)	-382.17	184.10	-259.40	
<b>Argón</b>	Ar(g)	0.00	154.84	0.00	
<b>Arsénico</b>	As(s)	0.00	35.10	0.00	
	H <sub>3</sub> As(g)	66.44	222.78	68.93	
	As <sub>2</sub> O <sub>5</sub> (s)	-924.87	105.40	-782.30	
	AsCl <sub>3</sub> (l)	-305.00	216.30	-259.40	
<b>Azufre</b>	S(s,rómbico)	0.00	31.8	0.00	
	S(g)	278.8	167.8	-38.30	
	S <sub>8</sub> (g)	102.30	430.98	49.63	
	S <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> (g)	-18.00	331.00	-31.80	
	SF <sub>6</sub> (g)	-1209.00	291.7	-1105.00	
	H <sub>2</sub> S(g)	-20.60	205.7	-33.60	
	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> (l)	-814.00	156.9	-690.10	
	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> (aq)	-907.50	17.00	-742.00	
	SO <sub>2</sub> (g)	-296.80	248.1	-300.20	
	SO <sub>3</sub> (g)	-395.60	256.6	-371.10	
	SOCl <sub>2</sub> (l)	-206.00	—	—	
	SO <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> (l)	-389.00	—	—	
	<b>Bario</b>	Ba(s)	0.00	62.80	0.00
BaCl <sub>2</sub> (s)		-860.10	126.00	-810.90	
BaCO <sub>3</sub> (s)		-1216.30	112.10	-1137.60	
BaF <sub>2</sub> (s)		-1207.10	96.36	-1156.80	
Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> (s)		-992.07	213.80	-796.59	
BaO(s)		-553.50	70.42	-525.10	
BaSO <sub>4</sub> (s)		-1465.00	132.00	-1353.00	
<b>Berilio</b>	Be(s)	0.00	9.54	0.00	
	BeCl <sub>2</sub> (s)	-490.40	82.68	-445.60	
	BeF <sub>2</sub> (s)	-1026.80	53.35	-979.40	
	BeO(s)	-609.60	14.14	-580.30	
	Be(OH) <sub>2</sub> (s)	-907.10	50.20	-817.60	
	BeSO <sub>4</sub> (s)	-1205.20	77.91	-1093.80	
<b>Bismuto</b>	Bi(s)	0.00	56.74	0.00	
	BiCl <sub>3</sub> (s)	-379.10	177.00	-315.00	
	Bi <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (s)	-573.88	151.50	-493.70	
	Bi <sub>2</sub> S <sub>3</sub> (s)	-143.10	200.40	-140.60	
<b>Boro</b>	B(s)	0.00	5.86	0.00	
	BCl <sub>3</sub> (l)	-427.20	206.30	-387.40	
<b>Bromo</b>	B <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (g)	35.60	232.11	86.70	
	BF <sub>3</sub> (g)	-1137.00	254.12	-1120.33	
	H <sub>3</sub> BO <sub>3</sub> (s)	-1094.33	88.83	-968.92	
	NaBH <sub>4</sub> (s)	-183.34	104.68	-119.54	
	Br(g)	111.80	174.90	82.40	
	Br <sub>2</sub> (l)	0.00	152.23	0.00	
	Br <sub>2</sub> (g)	30.91	245.40	3.14	
	BrF <sub>3</sub> (g)	-255.60	292.40	-229.50	
	HBr(g)	-36.40	198.59	-53.43	
	<b>Cadmio</b>	Cd(s)	0.00	51.76	0.00
		CdCl <sub>2</sub> (s)	-391.50	115.27	-343.93
		CdO(s)	-258.20	54.80	-228.40
		CdS(s)	-161.90	64.90	-156.50
	<b>Calcio</b>	Ca(s)	0.00	41.60	0.00
		Ca(g)	192.60	154.80	158.90
		Ca <sup>2+</sup> (aq)	-542.80	253.10	-553.50
		CaBr <sub>2</sub> (s)	682.80	130.00	-663.60
		CaC <sub>2</sub> (s)	-62.80	70.30	-67.80
		CaCO <sub>3</sub> (s)	-1207.00	92.90	-1129.00
CaCl <sub>2</sub> (s)		-795.00	114.00	-750.20	
CaF <sub>2</sub> (s)		-1215.00	68.87	-1162.00	
CaH <sub>2</sub> (s)		-189.00	42.00	-150.00	
CaO(s)		-635.50	40.00	-604.20	
CaS(s)		-482.40	56.50	-477.40	
Ca(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> (s)		-938.39	193.30	-743.07	
Ca(OH) <sub>2</sub> (s)		-986.60	76.10	-896.80	
Ca(OH) <sub>2</sub> (aq)		-1002.80	76.15	-867.60	
Ca <sub>3</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> (s)		-4120.80	236.00	-3884.70	
CaSO <sub>4</sub> (s)		-1433.00	107.00	-1320.00	
<b>Carbono</b>	C(s,grafito)	0.00	5.74	0.00	
	C(s,diamante)	1.90	2.38	2.90	
	C(g)	716.70	158.00	671.30	
	CCl <sub>4</sub> (l)	-135.40	216.40	-65.27	
	CCl <sub>4</sub> (g)	-103.00	309.70	-60.63	
	CHCl <sub>3</sub> (l)	-134.50	202.00	-73.72	
	CHCl <sub>3</sub> (g)	-103.10	295.60	-70.37	
	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> (g)	-121.46	177.80	-67.26	
	CH <sub>3</sub> Cl(g)	-80.83	234.58	-57.37	
	CF <sub>4</sub> (g)	-925.00	261.61	-879.00	
	CF <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> (g)	-477.00	301.00	-440.00	
	CH <sub>3</sub> CF <sub>3</sub> (l)	-737.00	280.00	-668.00	
	CH <sub>4</sub> (g)	-74.81	186.20	-50.75	
	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> (g)	226.70	200.80	209.20	
	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> (g)	52.26	219.50	68.12	
	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (g)	-84.86	229.50	-32.90	
	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> (g)	20.41	266.90	62.75	
	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> (g)	-103.80	269.90	-23.49	
	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> (l)	49.03	172.80	124.50	
	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> (l)	-250.30	361.20	16.32	





Especie química		$\Delta H_f^\circ$ [kJ/mol]	$S^\circ$ [J/mol K]	$\Delta G_f^\circ$ [kJ/mol]	Especie química		$\Delta H_f^\circ$ [kJ/mol]	$S^\circ$ [J/mol K]	$\Delta G_f^\circ$ [kJ/mol]	
	(n-octano)				<b>Cobalto</b>	CoO(s)	-237.94	52.97	-214.20	
	CH <sub>3</sub> OH(l)	-238.66	126.80	-166.27		Co <sub>3</sub> O <sub>4</sub> (s)	-891.00	102.50	-774.00	
	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH(l)	-277.70	161.00	-174.90		CoCl <sub>2</sub> (s)	-312.50	109.16	-269.80	
	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH(g)	-235.10	282.60	-168.60		CoSO <sub>4</sub> (s)	-888.30	118.00	-782.30	
	HCOOH(aq)	-425.60	92.00	-351.00	<b>Cromo</b>	Cr(s)	0.00	23.80	0.00	
	HCOOH(l)	-424.72	128.95	-361.35		Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (s)	-1139.70	81.20	-1058.10	
	HCHO(g)	-108.57	218.77	-102.53		Cr <sub>2</sub> Cl <sub>3</sub> (s)	-556.50	123.00	-486.10	
	CH <sub>3</sub> CHO(g)	-166.19	250.30	-128.86		(NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> Cr <sub>2</sub> O <sub>7</sub> (s)	-1807.00	—	—	
	CH <sub>3</sub> COOH(l)	-484.50	159.80	-389.90	<b>Estaño</b>	Sn(s, blanco)	0.00	51.55	0.00	
	H <sub>2</sub> C <sub>2</sub> O <sub>4</sub> (s)	-828.93	115.60	-697.20		Sn(s, gris)	-2.09	44.1	0.13	
	H <sub>2</sub> C <sub>2</sub> O <sub>4</sub> (aq)	-825.10	45.61	-673.90		SnCl <sub>2</sub> (s)	-350.00	—	—	
	HCN(g)	135.10	201.78	124.70		SnCl <sub>4</sub> (l)	-511.30	258.6	-440.20	
	CH <sub>3</sub> NH <sub>2</sub> (l)	-47.30	150.21	35.60		SnCl <sub>4</sub> (g)	-471.50	366.00	-432.20	
	CO(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (s)	-334.00	105.00	-198.00		SnO(s)	-285.80	56.5	-256.90	
	CH <sub>3</sub> CN(l)	54.00	150.00	99.00		SnO <sub>2</sub> (s)	-580.70	52.3	-519.70	
	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N(l)	172.90	188.00	208.60	<b>Estroncio</b>	Sr(s)	0.00	52.30	0.00	
	CO(g)	-110.50	197.60	-137.20		SrCl <sub>2</sub> (s)	-828.90	114.85	-781.10	
	CO <sub>2</sub> (g)	-393.50	213.60	-394.40		SrCO <sub>3</sub> (s)	-1220.10	97.10	-1140.10	
	CO <sub>2</sub> (aq)	-413.80	117.60	-385.98		SrO(s)	-592.00	54.40	-561.90	
	COCl <sub>2</sub> (g)	-223.00	289.20	-210.50	<b>Flúor</b>	F <sub>2</sub> (g)	-322.00	—	—	
	CS <sub>2</sub> (g)	117.40	237.70	67.15		F <sub>2</sub> (aq)	-332.60	—	-278.80	
	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> SO(l)	-203.00	188.00	-99.00		F(g)	78.99	158.60	61.92	
	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub> (s) (glucosa)	-1274.50	212.10	-910.56		F <sub>2</sub> (g)	0.00	202.70	0.00	
	C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O <sub>11</sub> (s) (sacarosa)	-2221.70	360.24	-1544.30		HF(g)	-271.00	173.70	-273.00	
						HF(aq)	-320.08	88.70	-296.80	
	<b>Cesio</b>	Cs(s)	0.00	85.23	0.00	<b>Fósforo</b>	P(g)	314.60	163.10	278.30
		Cs <sup>+</sup> (aq)	-248.00	133.00	-282.00		P <sub>4</sub> (s, blanco)	0.00	177.00	0.00
		CsF(aq)	-568.60	123.00	-558.50		P <sub>4</sub> (s, rojo)	-73.60	91.20	-48.50
							P <sub>4</sub> (g)	58.91	279.98	24.44
	<b>Cloro</b>	Cl <sub>2</sub> (g)	0.00	223.00	0.00		PCl <sub>3</sub> (g)	-306.40	311.70	-286.30
Cl(g)		121.70	165.10	105.70	PCl <sub>5</sub> (g)		-398.90	353.00	-324.60	
Cl <sub>2</sub> (g)		-226.00	—	—	PF <sub>3</sub> (g)		-918.80	273.24	-897.50	
Cl <sub>2</sub> (aq)		-167.29	56.48	-131.26	PH <sub>3</sub> (g)		5.40	210.10	13.00	
ClO(g)		101.22	—	—	P <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (s)		-2984.00	228.90	-2698.00	
ClO <sub>2</sub> (g)		104.60	249.40	123.40	H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> (s)		-1281.00	110.50	-1119.00	
Cl <sub>2</sub> O(g)		80.00	266.00	98.00	<b>Germanio</b>	Ge(s)	0.00	3.00	0.00	
ClF(g)		-54.48	217.89	-55.94		GeH <sub>4</sub> (g)	91.00	217.00	113.00	
ClF <sub>3</sub> (g)		-163.20	281.61	-123.00		GeCl <sub>4</sub> (g)	-496.00	348.00	-457.00	
HCl(g)		-92.31	186.80	-95.30		GeO <sub>2</sub> (s)	-551.00	55.00	-497.00	
HCl(aq)		-167.40	55.10	-131.20	<b>Helio</b>	He(g)	0.00	126.15	0.00	
<b>Cobre</b>		Cu(s)	0.00	33.15		0.00	<b>Hidrógeno</b>	H(g)	218.00	114.60
		CuBr(s)	-104.60	96.11	-100.80	H <sub>2</sub> (g)		0.00	130.60	0.00
		CuCl(s)	-137.20	86.20	-119.86	H <sub>2</sub> O(l)		-285.80	69.91	-237.20
	CuCl <sub>2</sub> (s)	-220.10	108.07	-175.70	H <sub>2</sub> O(g)	-241.80		188.70	-228.60	
	CuI(s)	-67.80	96.70	-69.50	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> (l)	-187.80		109.60	-120.40	
	CuO(s)	-157.00	42.63	-130.00	<b>Hierro</b>	Fe(s)	0.00	27.30	0.00	
	Cu <sub>2</sub> O(s)	-168.60	93.14	-146.00		FeCl <sub>2</sub> (s)	-340.67	117.90	-302.30	
	CuS(s)	-53.10	66.50	-53.60		FeCl <sub>3</sub> (s)	-399.49	142.30	-334.00	
	Cu <sub>2</sub> S(s)	-79.50	120.90	-86.20		FeCO <sub>3</sub> (s)	-741.00	93.00	-667.00	
	CuSO <sub>4</sub> (s)	-771.36	109.00	-661.80		Fe(CO) <sub>5</sub> (l)	-774.00	338.00	-705.40	
Co(s)	0.00	30.04	0.00	Fe(CO) <sub>5</sub> (g)		-733.80	445.20	-697.30		

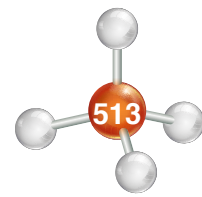




Especie química		$\Delta H_f^\circ$ [kJ/mol]	$S^\circ$ [J/mol K]	$\Delta G_f^\circ$ [kJ/mol]
	FeO(s)	-272.00	—	—
	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (s, hematita)	-824.20	87.40	2742.20
	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> (s, magnetita)	-1118.00	146.00	-1015.00
	Fe(OH) <sub>2</sub> (s)	-569.00	88.00	-486.50
	Fe(OH) <sub>3</sub> (s)	-8230.00	106.70	-696.50
	FeS <sub>2</sub> (s)	-177.50	122.20	-166.70
	FeSO <sub>4</sub> (s)	-928.40	107.50	-820.80
<b>Litio</b>	Li(s)	0.00	28.00	0.00
	LiAlH <sub>4</sub> (s)	-116.30	78.74	-44.70
	LiCl(s)	-408.61	59.33	-384.37
	LiF(s)	-615.97	35.65	-587.71
	LiH(s)	-90.54	20.01	-68.35
	LiNO <sub>3</sub> (s)	-483.13	90.00	-381.10
	LiOH(s)	-487.23	50.00	-443.90
	LiOH(aq)	-508.40	4.00	-451.10
<b>Mag-nesio</b>	Mg(s)	0.00	32.50	0.00
	Mg <sup>2+</sup> (aq)	-454.67	-138.10	-455.57
	MgBr <sub>2</sub> (s)	-524.30	117.20	-503.80
	MgCl <sub>2</sub> (s)	-641.00	89.50	-592.30
	MgCO <sub>3</sub> (s)	-1095.80	65.70	-1012.10
	MgF <sub>2</sub> (s)	-1123.40	57.24	-1070.20
	MgI <sub>2</sub> (s)	-364.00	129.00	-358.20
	Mg(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> (s)	-790.65	164.00	-589.40
	MgO(s)	-601.80	27.00	-569.60
	Mg(OH) <sub>2</sub> (s)	-924.70	63.14	-833.70
	Mg <sub>3</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> (s)	-3780.70	189.20	-3538.70
	MgS(s)	-347.00	—	—
	MgSO <sub>4</sub> (s)	-1284.90	91.60	-1170.60
	<b>Manga-neso</b>	Mn(s)	0.00	32.01
MnCl <sub>2</sub> (s)		-481.29	118.24	-440.50
MnO(s)		-385.22	59.71	-362.90
MnO <sub>2</sub> (s)		-520.03	53.05	-465.14
Mn <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (s)		-959.00	110.50	-881.10
Mn <sub>3</sub> O <sub>4</sub> (s)		-1387.80	155.60	-1283.20
MnSO <sub>4</sub> (s)		-1065.25	112.10	-957.36
<b>Mercurio</b>	Hg(l)	0.00	76.02	0.00
	Hg(g)	61.32	174.96	31.82
	HgCl <sub>2</sub> (s)	-224.30	146.00	-178.60
	Hg <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> (s)	-224.00	146.00	-179.00
	HgO(s, rojo)	-90.83	70.29	-58.56
	HgS(s, rojo)	-8.20	82.40	-50.60
<b>Neón</b>	Ne(g)	0.00	146.33	0.00
<b>Níquel</b>	Ni(s)	0.00	30.10	0.00
	NiCl <sub>2</sub> (s)	-82.00	52.97	-79.50
	Ni(CO) <sub>4</sub> (g)	-602.90	410.40	-587.30
	NiO(s)	-244.00	38.60	-216.00
	NiS(g)	-82.00	52.97	-79.50
	NiSO <sub>4</sub> (s)	-872.91	92.00	-759.70
<b>Nitrógeno</b>	N <sub>2</sub> (g)	0.00	191.50	0.00
	N(g)	472.70	153.19	455.58

Especie química		$\Delta H_f^\circ$ [kJ/mol]	$S^\circ$ [J/mol K]	$\Delta G_f^\circ$ [kJ/mol]
	NH <sub>3</sub> (g)	-46.11	192.30	-16.50
	NH <sub>3</sub> (aq)	-80,-9	111.30	-26.50
	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> (aq)	-132.51	113.40	-79.31
	N <sub>2</sub> H <sub>4</sub> (l)	50.63	121.20	149.20
	(NH <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> AsO <sub>4</sub> (aq)	-1268.00	—	—
	NH <sub>4</sub> Br(s)	-270.83	113.00	-175.20
	NH <sub>4</sub> Cl(s)	-314.40	94.60	-201.50
	NH <sub>4</sub> Cl(aq)	-300.20	—	—
	NH <sub>4</sub> HCO <sub>3</sub> (s)	-847.00	12.10	-666.00
	NH <sub>4</sub> I(s)	-201.40	117.00	-113.00
	NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub> (s)	-365.60	151.10	-184.00
	(NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> (s)	-1180.85	220.10	-901.67
	NF <sub>3</sub> (g)	-125.00	260.60	-83.30
	NO(g)	90.25	210.70	86.57
	NO <sub>2</sub> (g)	33.20	240.00	51.30
	N <sub>2</sub> O(g)	82.05	219.70	104.20
	N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (g)	83.72	321.28	139.46
	N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> (g)	9.16	304.20	97.82
	N <sub>2</sub> O <sub>5</sub> (g)	11.00	356.00	115.00
	N <sub>2</sub> O <sub>5</sub> (s)	-43.10	178.00	114.00
	NOCl(g)	52.59	264.00	66.36
	HNO <sub>3</sub> (l)	-174.10	155.60	-80.79
	HNO <sub>3</sub> (g)	-135.10	266.20	-74.77
	HNO <sub>3</sub> (aq)	-206.60	146.00	-110.50
<b>Oro</b>	Au(s)	0.00	48.00	0.00
<b>Oxi-geno</b>	O <sub>2</sub> (g)	0.00	205.00	0.00
	O(g)	249.20	161.00	231.80
	O <sub>3</sub> (g)	143.00	238.80	163.00
	OF <sub>2</sub> (g)	23.00	246.60	41.00
	<b>Plata</b>	Ag(s)	0.00	42.55
Ag <sub>1</sub> (aq)		105.79	73.86	77.12
AgBr(s)		-100.37	107.1	-96.90
AgCl(s)		-126.90	96085.00	-109.80
AgI(s)		-61.84	115.5	-66.19
AgNO <sub>3</sub> (s)		-124.39	140.92	-33.41
Ag <sub>2</sub> O(s)		-31.05	121.3	-11.20
Ag <sub>2</sub> S(s)		-32.59	144.01	-40.67
AgSCN(s)		87.9	131.0	101.36
Ag <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> (s)		-715.88	200.4	-618.41
<b>Plomo</b>	Pb(s)	0.00	64.81	0.00
	PbCl <sub>2</sub> (s)	-359.40	136.00	-314.10
	PbO(s, amarillo)	-217.30	68.70	-187.90
	PbO <sub>2</sub> (s)	-277.40	68.60	-217.33
	Pb(OH) <sub>2</sub> (s)	-515.90	88.00	-420.90
	PbS(s)	-100.40	91.20	-98.70
	PbSO <sub>4</sub> (s)	-919.94	148.57	-813.14
<b>Pota-sio</b>	K(s)	0.00	63.60	0.00
	KBr(s)	-393.80	95.90	-380.66
	KCl(s)	-436.50	82.60	-408.80
	KClO <sub>3</sub> (s)	-391.20	143.10	-289.90

Continúa...

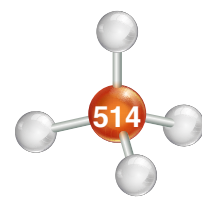






Especie química		$\Delta H_f^\circ$ [kJ/mol]	$S^\circ$ [J/mol K]	$\Delta G_f^\circ$ [kJ/mol]
	KClO <sub>4</sub> (s)	-432.75	82.59	-409.14
	K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (s)	-1151.02	155.52	-1063.50
	K <sub>2</sub> Cr <sub>2</sub> O <sub>4</sub> (s)	-1403.70	200.12	-1295.70
	K <sub>2</sub> Cr <sub>2</sub> O <sub>7</sub> (s)	-2061.50	291.20	-1887.80
	KF(s)	-567.27	66.57	-537.75
	KI(s)	-327.90	106.40	-323.00
	KMnO <sub>4</sub> (s)	-837.20	171.71	-737.60
	KNO <sub>3</sub> (s)	-494.63	13.05	-394.86
	KO <sub>2</sub> (s)	284.93	116.70	-239.40
	K <sub>2</sub> O <sub>2</sub> (s)	-494.10	102.10	-425.10
	KOH(s)	-424.70	78.91	-378.90
	KOH(aq)	-481.20	92.00	-439.60
	K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> (s)	-1437.79	175.56	-1321.37
<b>Rubidio</b>	Rb(s)	0.00	76.78	0.00
	RbOH(aq)	-481.16	110.75	-441.24
<b>Selenio</b>	Se(s)	0.00	42442.00	0.00
	H <sub>2</sub> Se(g)	-9.70	219.02	15.9
<b>Silicio</b>	Si(s)	0.00	18.8	0.00
	SiBr <sub>4</sub> (l)	-457.30	277.8	-443.90
	SiC(s)	-65.30	16.6	-62.80
	SiCl <sub>4</sub> (g)	-657.00	330.6	-617.00
	SiCl <sub>4</sub> (l)	-687.00	239.7	-619.84
	SiH <sub>4</sub> (g)	34.3	204.5	56.9
	SiF <sub>4</sub> (g)	-1615.00	282.4	-1573.00
	SiI <sub>4</sub> (g)	-132.00	—	—
	SiO <sub>2</sub> (s)	-910.90	41.84	-856.70
	H <sub>2</sub> SiO <sub>3</sub> (s)	-1189.00	134.00	-1092.00
	H <sub>4</sub> SiO <sub>4</sub> (s)	-1481.10	192.00	-1332.90
	Na <sub>2</sub> SiO <sub>3</sub> (s)	-1079.00	—	—
	H <sub>2</sub> SiF <sub>6</sub> (aq)	-2331.00	—	—
	<b>Sodio</b>	Na(s)	0.00	51.0
Na(g)		108.7	153.6	78.11
Na (g)		601.00	—	—
Na (aq)		-240.20	59.0	-261.90
NaBr(s)		-359.90	86.82	-348.98
NaCl(s)		-411.00	72.38	-384.00
NaCl(aq)		-407.10	115.5	-393.00
NaClO <sub>4</sub> (s)		-383.30	142.3	-254.85
NaCN(s)		-87.49	118.49	-76.40
NaCH <sub>3</sub> COO(s)		-708.80	123.0	-607.18
Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (s)		-1131.00	136.00	-1048.00
NaF(s)		-573.65	51.46	-543.49
NaH(s)		-56.28	40016.00	-33.46
NaHCO <sub>3</sub> (s)		-950.81	101.7	-851.00
NaHSO <sub>4</sub> (s)		-1125.50	113.0	-992.80
NaH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> (s)		-1538.00	128.00	-1387.00
Na <sub>2</sub> HPO <sub>4</sub> (s)		-1749.00	151.00	-1609.00
NaI(s)		-287.78	98.53	-286.06
NaNO <sub>3</sub> (s)		-467.85	116.52	-367.00
Na <sub>2</sub> O(s)		-414.22	75.06	-375.46
Na <sub>2</sub> O <sub>2</sub> (s)		-510.87	95.0	-447.70
NaOH(s)		-426.70	64.45	-379.49

Especie química		$\Delta H_f^\circ$ [kJ/mol]	$S^\circ$ [J/mol K]	$\Delta G_f^\circ$ [kJ/mol]
	NaOH(aq)	-469.60	49.8	-419.20
	Na <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> (s)	-1917.40	173.80	-1788.80
	Na <sub>2</sub> S(s)	-364.80	83.7	-349.80
	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> (s)	-1387.08	149.58	-1270.16
	Na <sub>2</sub> S <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (s)	-1123.00	155.00	-1028.00
<b>Telurio</b>	Te(s)	0.00	49.71	0.00
	TeO <sub>2</sub> (s)	-322.60	79.5	-270.30
<b>Titanio</b>	Ti(s)	0.00	30.60	0.00
	TiCl <sub>4</sub> (l)	-804.20	252.30	-737.20
	TiCl <sub>4</sub> (g)	-763.20	354.80	-726.80
<b>Tungsteno</b>	W(s)	0.00	32.6	0.00
	WO <sub>3</sub> (s)	-842.90	75.90	-764.10
<b>Uranio</b>	U(s)	0.00	50.21	0.00
	UF <sub>6</sub> (s)	-2147.40	377.9	-2063.70
	UO <sub>2</sub> (s)	-1084.90	77.03	-1031.70
	UO <sub>3</sub> (s)	-1223.80	96.11	-1145.90
<b>Xenón</b>	Xe(g)	0.00	169.68	0.00
	XeF <sub>2</sub> (g)	-130.00	260.00	-96.00
	XeF <sub>4</sub> (g)	-215.00	316.00	-138.00
	XeO <sub>3</sub> (g)	502.00	287.00	561.00
<b>Yodo</b>	I(g)	106.60	180.66	70.16
	I <sub>2</sub> (s)	0.00	116.10	0.00
	I <sub>2</sub> (g)	62.44	260.60	19.36
	ICl(g)	17.78	247.40	25.52
	HI(g)	26.50	206.50	1.72
<b>Zinc</b>	Zn(s)	0.00	41.63	0.00
	ZnCl <sub>2</sub> (s)	-415.05	111.46	-369.40
	ZnCO <sub>3</sub> (s)	-812.78	82.4	-731.52
	ZnO(s)	-348.30	43.64	-318.30
	Zn(OH) <sub>2</sub> (s)	-643.25	81.6	-555.07
	ZnS(s)	-205.60	57.7	-201.30
	ZnSO <sub>4</sub> (s)	-982.80	110.5	-871.50





# Apéndice B

## Clasificación de los fluidos petroleros de acuerdo con sus fases

Recopilado por Héctor Erick Gallardo Ferrera

La forma general del diagrama  $p - T$  para los fluidos petroleros se muestra en la Figura B.1. Las curvas dentro de la región de dos fases del diagrama se denominan *líneas de saturación*, e indican las condiciones en las que la mezcla existe con un mismo porcentaje de volumen líquido (VL). El caso límite corresponde a las curvas de burbujeo y rocío, que indican proporciones del 100 y cero por ciento del VL respectivamente. Todas las curvas convergen al punto crítico (PC).

Fuera de la envolvente de fases, en el diagrama de la Figura B.1, la línea  $\bar{a}\bar{a}$  se denomina *cricondenbara* y la  $\bar{b}\bar{b}$ , *cricondenterma*. Estas muestran la máxima presión y temperatura, respectivamente, a la que las fases líquido y vapor de una mezcla existen en condiciones de equilibrio.

Otra cualidad importante de los diagramas de dos componentes es ilustrada por la línea  $\bar{1}\bar{2}\bar{3}$ . Para un componente puro que existe como líquido, el decremento en la presión en un proceso isotérmico por debajo de la presión de vapor causa la vaporización del sistema. No obstante, en la Figura B.1 puede observarse que, para un sistema binario en estado gaseoso en 1, la reducción de la presión permite la condensación (en el punto de rocío) y paulatino incremento en el VL del sistema, cuyo máximo valor se alcanzará en 2. A partir de este punto la disminución en la presión ocasionará la revaporización del líquido hasta llegar a un nuevo punto de rocío. En 3 la mezcla existirá de nuevo sólo en estado gaseoso.

Debido a que la formación de líquido a causa de un descenso en la presión es un proceso contrario al esperado en un componente puro, al comportamiento descrito se denomina *condensación retrógrada*. A la región definida por el cambio de concavidad en las curvas de calidad de la mezcla en un diagrama  $p - T$ , y que en la Figura B.1 se encuentra representada por una región sombreada, se le conoce como *zona de condensación retrógrada*. Debe observarse que las condiciones a las se tiene el valor máximo del VL en un sistema coinciden con este punto. En ocasiones, cuando existen dos puntos de rocío distintos para una misma temperatura, al superior se le llama *punto de rocío retrógrado*.

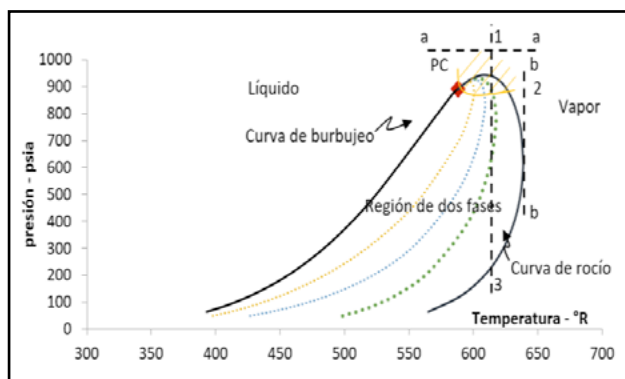


Figura B.1. Diagrama de fases  $p - T$  de una mezcla de fluidos petroleros.



La naturaleza y composición de los hidrocarburos dependen de su ambiente de formación, así como de las condiciones geológicas de alojamiento; por ello el comportamiento de cada mezcla es único. Sin embargo, es posible clasificarlos conforme a sus propiedades y composición con ayuda de los diagramas  $p - T$  como: (1) aceite negro, (2) aceite volátil, (3) gas retrógrado, (4) gas húmedo, y (5) gas seco. A continuación, se describe el comportamiento esperado durante la explotación.

### 1. Aceite negro.

La Figura B.2 muestra el diagrama típico  $p - T$  de un aceite negro. La línea  $\overline{123}$  indica el proceso de abatimiento isotérmico en el yacimiento e incluye las condiciones de presión y temperatura en las que se encuentra el separador a condiciones de superficie.

Mientras la presión del yacimiento se encuentre a lo largo de la línea  $\overline{12}$ , el aceite es un líquido y la reducción en la presión del sistema sólo provocará la expansión de su volumen. En el punto 2, se encuentran las condiciones de presión y temperatura a las que se forma la primera burbuja infinitesimal de gas en la mezcla. En el trayecto denotado por la línea  $\overline{23}$  habrá aceite y gas en diferentes proporciones, por lo que la mezcla liberará gas conforme la presión se reduzca y el volumen de líquido se reducirá progresivamente. A pesar del encogimiento del aceite, las condiciones de separación superficial indican que una cantidad considerable de líquido llega a superficie, por lo que también se les denomina *aceites de bajo-encogimiento*.

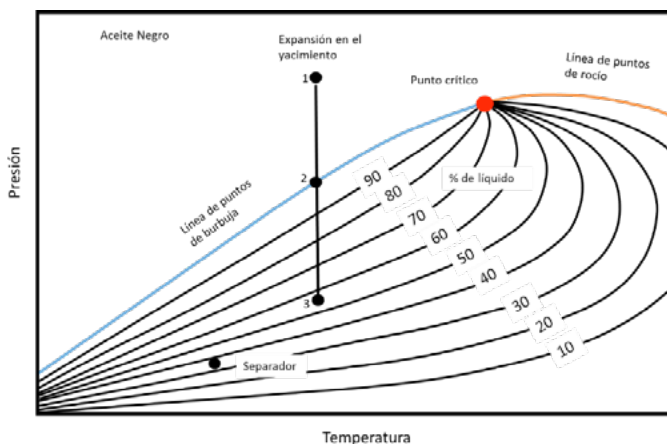


Figura B.2. Diagrama  $p-T$  típico de un aceite negro.

Los sistemas de aceite negro están constituidos por una amplia gama de especies químicas, muchas de las que incluyen moléculas largas, pesadas, y no-volátiles, lo que provoca que los fluidos posean una coloración oscura –a lo que deben su nombre– aunque no siempre son de color negro. Además, por la baja cantidad de componentes ligeros, su composición casi siempre es constante y su gas asociado no tiene condensados.

### 2. Aceite volátil.

La Figura B.3 muestra un diagrama  $p - T$  típico para estos fluidos. Las líneas de calidad están muy próximas entre sí y a la línea de burbujeo. La temperatura del yacimiento se aproxima más al punto crítico que en un aceite negro.

La proximidad entre las líneas de calidad indica que este tipo de aceites liberan una gran cantidad de gas ante una pequeña reducción de presión, razón por la que se les denomina *volátiles*. Debido a que las condiciones en las que se ubica el separador indican que la

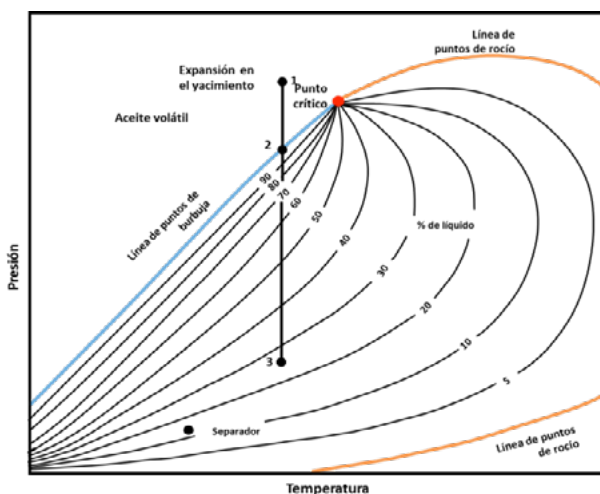


Figura B.3. Diagrama  $p-T$  típico de un aceite volátil (McCain, 1993).



cantidad de líquido que llega a la superficie es muy pequeña, estos fluidos también se denominan *aceites de alto encogimiento*.

Los sistemas de aceite volátil están constituidos por una mayor cantidad de componentes intermedios (entre el etano y el hexano) que los aceites negros, por lo que se reduce la cantidad de moléculas pesadas y es favorecida la formación retrógrada de condensados del gas asociado a este fluido, durante un abatimiento de presión.

### 3. Gas y condensado.

La Figura B.4 muestra un diagrama  $p - T$  típico de un sistema de gas y condensado; caso que se presenta cuando la temperatura del yacimiento cae entre el punto crítico y la cricondenterma. En el punto 1, la presión del yacimiento es superior a la de rocío, por lo que el fluido se encontrará estrictamente como gas. Entre la línea  $\overline{12}$ , únicamente se formará líquido durante el transporte de los fluidos al separador. Conforme la presión se reduce, se llega a las condiciones de rocío del fluido en el punto 2 y se forma una gota de líquido condensado en el yacimiento. Este líquido normalmente no fluye en el yacimiento.

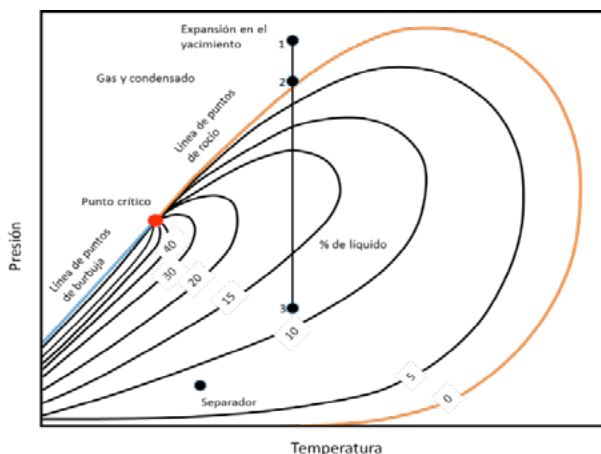


Figura B.4. Diagrama  $p-T$  típico de un sistema de gas y condensado.

A partir del punto de rocío, el abatimiento de la presión del yacimiento provocará la formación de una mayor cantidad de condensado, hasta que se llegue a la presión que indique el fin de la zona de condensación retrógrada. Después de este punto, el líquido volverá a evaporarse. Esto ocurre en condiciones de laboratorio mientras la composición total de la mezcla no cambie; empero, debido a la producción, la composición total de los fluidos del yacimiento cambia continuamente.

### 4. Gas húmedo.

La Figura B.5 muestra un diagrama  $p - T$  típico de un gas húmedo. En este caso la temperatura del yacimiento es mayor a la cricondenterma, por lo que no se forma líquido en el yacimiento; las condiciones de separación indican que se formará condensado en el trayecto a la superficie.

Los líquidos condensados producidos poseen un rango de densidades API similares a los sistemas de gas y condensado. Sin embargo, su valor permanece constante a lo largo de la explotación del yacimiento. El color de los líquidos normalmente es transparente.

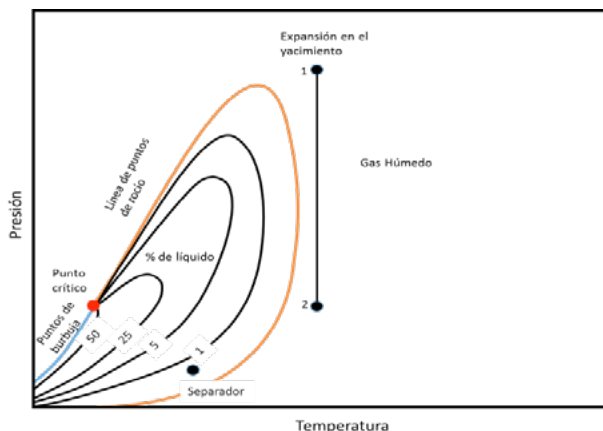


Figura B.5. Diagrama  $p-T$  típico de un gas húmedo.



### 5. Gas seco

Un sistema de gas seco está compuesto, principalmente, de metano con algunos intermedios. La Figura B.6 muestra un diagrama  $p - T$  típico de estos fluidos. La temperatura del yacimiento es mayor a la cricondenterma y las condiciones de separación no se encuentran dentro de la envolvente de fases. Esto indica que no se forman condensados en ningún punto

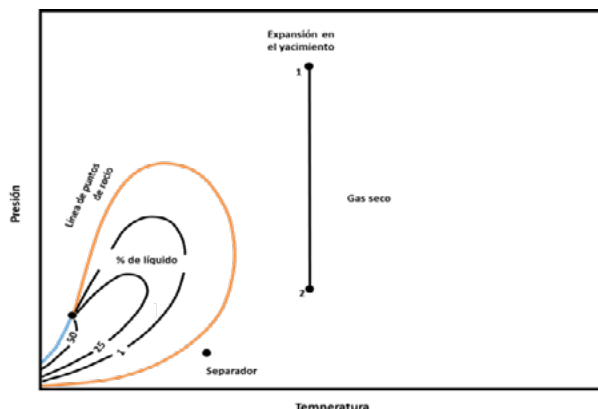


Figura B.6. Diagrama  $p-T$  típico de un gas seco.

### 6. Análisis de la fracción de $C_{7+}$ en los fluidos del yacimiento.

Las Figuras B.7 y B.8 muestran el comportamiento típico de cada uno de los fluidos discutidos sobre un mismo diagrama de fases genérico. Se observa que, conforme disminuye la cantidad de componentes pesados de los fluidos, las condiciones iniciales del yacimiento tienden a trasladarse a la derecha, pasando de la región de aceite a la de gas, por lo que una forma más adecuada para clasificar a los fluidos podría lograrse por el análisis de la fracción del pseudocomponente  $C_{7+}$  en los fluidos, mediante el uso de un diagrama ternario.

La Tabla B.1 muestra valores de composición y propiedades promedio para las mezclas descritas.

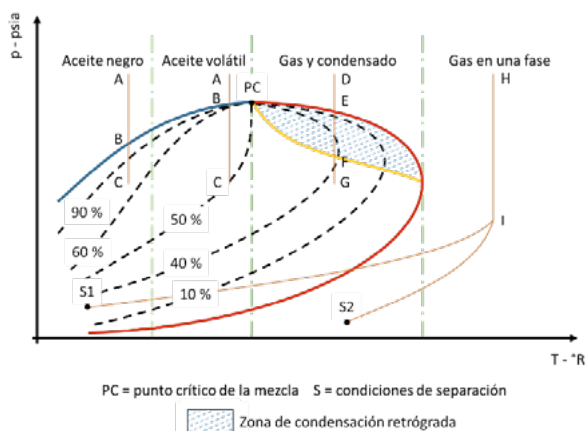


Figura B.7. Diagrama  $p-T$  genérico de los fluidos del yacimiento.

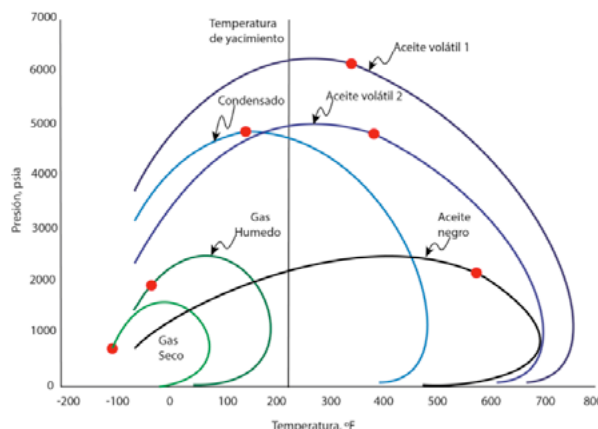


Figura B.8. Comportamiento de los fluidos petroleros en un diagrama de fases  $p-T$ .

Componente	Composición [%mol]				
	Gas Seco	Gas Húmedo	Gas Retrogrado	Aceite Volátil	Aceite Negro
CO <sub>2</sub>	0.10	1.41	2.37	1.82	0.02
N <sub>2</sub>	2.07	0.25	0.31	0.24	0.34
C <sub>1</sub> H <sub>4</sub>	86.12	92.46	73.19	57.60	34.62
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	5.91	3.18	7.80	7.35	4.11
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	3.58	1.01	3.55	4.21	1.01
i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	1.72	0.28	0.71	0.74	0.76
n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	-	0.24	1.45	2.07	0.49
i-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	0.50	0.13	0.64	0.53	0.43
n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	-	0.08	0.68	0.95	0.21
n-C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	-	0.14	1.09	1.92	1.61
C <sub>7+</sub>	-	0.82	8.21	22.57	56.40
Propiedades					
RGA, scf/stb	∞	69,000	5,965	1,465	320
M <sub>C<sub>7+</sub></sub>	-	130	184	228	274
γ <sub>C<sub>7+</sub></sub>	-	0.763	0.816	0.858	0.920
γ <sub>API</sub>	-	57	49	38	24

Tabla B.1. Composición y propiedades típicas de los fluidos petroleros.





# Apéndice C

## Normatividad de la geotermia en México

Recopilado por Gabriel Salinas Calleros.

### Aspectos legales de la geotermia en México

*Propiedad de la nación sobre su territorio.* La Constitución Política de los Estados Unidos Mexicanos define la naturaleza del derecho que la nación tiene sobre su territorio y todos los bienes que en él se encuentren. Es al Estado en su totalidad al que se le asigna la titularidad de la propiedad sobre el territorio y no en particular a la Federación, a las entidades federativas o a los municipios.

El artículo 27, párrafo primero de la Constitución Política de los Estados Unidos Mexicanos reconoce:

“La propiedad de las tierras y aguas comprendidas dentro de los límites del territorio nacional corresponde originariamente a la nación, la cual ha tenido y tiene el derecho de transmitir el dominio de ellas a los particulares, constituyendo la propiedad privada”.

Una vez constituida la propiedad privada el párrafo tercero del mismo precepto, ordena:

“La nación tendrá en todo tiempo el derecho de imponer a la propiedad privada las modalidades que dicte el interés público, así como el de regular el aprovechamiento de los elementos naturales susceptibles de apropiación para hacer una distribución equitativa de la riqueza pública y para cuidar de su conservación”.

El Estado tiene una potestad soberana sobre su territorio, una propiedad originaria y tradicional, un derecho real institucional o con mayor extensión un pleno derecho de propiedad definido y depurado por el derecho internacional, si nos atenemos a su sentido moderno.

También el Estado tiene el derecho de regular toda la propiedad, pública y privada, que otorga o concede a los particulares. El particular sustituye al Estado en el ejercicio del derecho privado, pero conservando aquél un derecho superior para regular el régimen de la propiedad como una función social, inspirada siempre en el interés público.

En suma, el Estado tiene un derecho real de propiedad sobre su territorio regido por principios de derecho público interno y externo.

El Estado mexicano tiene por consiguiente un derecho de propiedad sobre su territorio, y de acuerdo con la Constitución, esta propiedad es transmitida a los particulares, sujeta al régimen jurídico que ésta determine.

El territorio es la porción de la corteza terrestre en la que se asientan los grupos humanos y se realiza la actividad estatal.



Sobre el territorio de cada estado corresponde el ámbito de vigencia de su orden jurídico y constituye el medio de subsistencia de la población al mismo tiempo que se establecen relaciones patrimoniales entre los entes públicos y privados.

El territorio mexicano está regulado jurídicamente en la Constitución Política de los Estados Unidos Mexicanos, artículos 27 y 42 a 49.

De acuerdo con el artículo 27 constitucional se reconoce la propiedad o dominio de la nación sobre su territorio. Desde su origen ella es la única titular de ese derecho real de propiedad.

El precepto constitucional nos habla de que esa propiedad corresponde originariamente a la nación, si bien esta entidad está representada por los diversos órganos que asumen la función política, o sea “la nación representada por el gobierno federal”, si nos atenemos al texto del propio artículo 27. La nación debemos pues considerarla referida, no a un concepto sociológico, sino a un concepto jurídico político como es la Federación, de acuerdo con las facultades constitucionales de que dispone.

La nación propietaria del territorio nacional tiene una importante facultad: ha tenido y tiene el derecho de transmitir el dominio de las tierras y aguas a los particulares constituyendo la propiedad privada.

Hemos indicado que el territorio es la porción de la corteza terrestre en la que se asientan los grupos humanos y se realiza la actividad estatal.

Sobre el territorio de cada estado corresponde el ámbito de vigencia de su orden jurídico y constituye el medio de subsistencia de la población al mismo tiempo que se establecen relaciones patrimoniales entre los entes públicos y privados.

Sin embargo, no ocurre lo mismo con los bienes del subsuelo, sobre los cuales la Nación, representada por el Ejecutivo Federal, mantiene la propiedad originaria y soberana, impidiendo su aprovechamiento libre, sino a través de concesiones, a excepción de las aguas alumbradas en los terrenos particulares, las que a su vez se encuentran limitadas por las vedas o restricciones impuestas para su explotación.

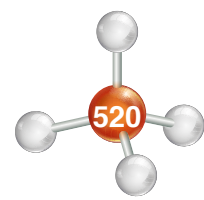
Si analizamos los diversos preceptos que regulan la propiedad, veremos que el estado reconoce la propiedad privada al mismo tiempo que impone severas restricciones a su ejercicio, tal es, por vía de ejemplo, el párrafo tercero del artículo 27 constitucional que ordena: “La nación tendrá en todo tiempo el derecho de imponer a la propiedad privada las modalidades que dicte el interés público”.

## Los recursos naturales en la Constitución Política de los Estados Unidos Mexicanos

El dominio nacional o dominio del estado es una expresión muy amplia que comprende todos los bienes corporales e incorporales, muebles e inmuebles, que pertenecen a las diversas entidades públicas, sometidos a un régimen de derecho público y sólo por excepción a un régimen de derecho privado.

De esta manera el artículo 27, párrafos cuarto, quinto y sexto de la Constitución Política de los Estados Unidos Mexicanos, expresa:

“Corresponde a la nación el dominio directo de todos los recursos naturales de la plataforma continental y los zócalos submarinos de las islas; de todos los minerales o sustancias que en vetas, mantos, masas o yacimientos, constituyan depósitos cuya naturaleza sea distinta de los





componentes de los terrenos, tales como los minerales de los que se extraigan metales y metaloides utilizados en la industria; los yacimientos de piedras preciosas, de sal de gema y las salinas formadas directamente por las aguas marinas; los productos derivados de la descomposición de las rocas, cuando su explotación necesite trabajos subterráneos; los yacimientos minerales u orgánicos de materias susceptibles de ser utilizadas como fertilizantes; los combustibles minerales sólidos; el petróleo y todos los carburos de hidrógeno sólidos, líquidos o gaseosos; y el espacio situado sobre el territorio nacional, en la extensión y términos que fije el derecho internacional”.

Son propiedad de la nación las aguas de los mares territoriales en la extensión y términos que fije el Derecho internacional; las aguas marinas interiores; las de las lagunas y esteros que se comuniquen permanente o intermitentemente con el mar; las de los lagos interiores de formación natural que estén ligados directamente a corrientes constantes; las de los ríos y sus afluentes directos o indirectos, desde el punto del cauce en que se inicien las primeras aguas permanentes, intermitentes o torrenciales, hasta su desembocadura en el mar, lagos, lagunas o esteros de propiedad nacional; las de corrientes constantes o intermitentes y sus afluentes directos o indirectos, cuando el cauce de aquéllas en toda su extensión o en parte de ellas, sirva de límite al territorio nacional o a dos entidades federativas, o cuando pase de una entidad federativa a otra o cruce la línea divisoria de la República; la de los lagos, lagunas o esteros cuyos vasos, zonas o riberas, estén cruzados por líneas divisorias de dos o más entidades o entre la República y un país vecino, o cuando el límite de las riberas, sirva de lindero entre dos entidades federativas o a la República con un país vecino; las de los manantiales que broten en las playas, zonas marítimas, cauces, vasos o riberas de los lagos, lagunas o esteros de propiedad nacional, y las que se extraigan de las minas; y los cauces, lechos o riberas de los lagos y corrientes interiores en la extensión que fije la ley. Las aguas del subsuelo pueden ser libremente alumbradas mediante obras artificiales y apropiarse por el dueño del terreno, pero cuando lo exija el interés público o se afecten otros aprovechamientos, el Ejecutivo Federal podrá reglamentar su extracción y utilización y aun establecer zonas vedadas, al igual que para las demás aguas de propiedad nacional. Cualesquiera otras aguas no incluidas en la enumeración anterior, se considerarán como parte integrante de la propiedad de los terrenos por los que corran o en los que se encuentren sus depósitos, pero si se localizaron en dos o más predios el aprovechamiento de estas aguas se considerará de utilidad pública, y quedará sujeto a las disposiciones que dicten los estados.

En los casos a que se refieren los dos párrafos anteriores, el dominio de la nación es inalienable e imprescriptible y la explotación, el uso o el aprovechamiento de los recursos de que se trata, por los particulares o por sociedades constituidas conforme a las leyes mexicanas, no podrá realizarse sino mediante concesiones otorgadas por el Ejecutivo Federal de acuerdo con las reglas y condiciones que establezcan las leyes. Las normas legales relativas a obras o trabajos de explotación de los minerales y sustancias a que se refiere el párrafo cuarto, regularán la ejecución y comprobación de los que se efectúen o deban efectuarse a partir de su vigencia, independientemente de la fecha de otorgamiento de las concesiones, y su inobservancia dará lugar a la cancelación de éstas. El gobierno federal tiene la facultad de establecer reservas nacionales y suprimirlas. Las declaratorias correspondientes se harán por el Ejecutivo en los casos y condiciones que las leyes prevean. Tratándose del petróleo y de los carburos de hidrógeno sólidos, líquidos o gaseosos, no se otorgarán concesiones ni contratos ni subsistirán los que se hayan otorgado y la nación llevará a cabo la explotación de esos productos, en los términos que señale la ley reglamentaria respectiva. Corresponde exclusivamente a la nación generar, conducir, transformar, distribuir y abastecer energía eléctrica que tenga por objeto la prestación de servicio público. En esta materia no se otorgarán concesiones a los particulares y la nación aprovechará los bienes y recursos naturales que se requieran para dichos fines.



De dicho régimen se deduce claramente que corresponde a la nación el dominio directo de todos los recursos naturales.

### **La reglamentación constitucional del subsuelo**

El subsuelo en la Constitución no está regulado como recurso natural, sino que se considera a través de sus usos para la regulación de la minería y de los hidrocarburos, así como el régimen del agua subterránea. No es considerado como un recurso natural o ambiental, es decir, en tanto su utilización como espacio, como sustento para el equilibrio de otros elementos del ecosistema o para prestar un servicio ambiental como espacio para depósito o lugar de confinamiento de residuos peligrosos o de rellenos sanitarios.

El principio constitucional es el párrafo primero del artículo 27, antes señalado, de suerte tal que bajo este principio podemos decir que el concepto de tierras y territorio abarcaría a su vez el concepto de subsuelo.

La Constitución Política de los Estados Unidos Mexicanos no regula específicamente a los suelos como tales, sino los considera por sus usos.

En México se omite la regulación del subsuelo, regulándose únicamente los usos superficiales del suelo, sin tomar en consideración que puedan existir zonas en las que el subsuelo o sus usos tengan mayor importancia que la superficie.

La del suelo superficial que se encuentra regulado por:

Legislación civil (propiedad inmobiliaria).

Legislación agraria (propiedad rural, pequeña propiedad y propiedad comunal y ejidal).

Legislación urbana (asentamientos humanos).

La del subsuelo que se encuentra regulado por:

Legislación minera.

Legislación de aguas del subsuelo.

Legislación petrolera.

Legislación ambiental (confinamientos de residuos peligrosos y rellenos sanitarios).

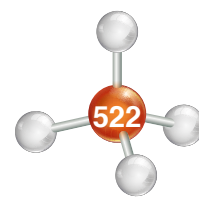
La constitución en el artículo 27 regula de una u otra manera todos estos usos del suelo y del subsuelo y tiene como prioridad el uso superficial del suelo; sólo en el caso del petróleo es prioritario el aprovechamiento del subsuelo.

### **Régimen constitucional de las aguas del subsuelo**

El concepto de aguas del subsuelo en la Constitución se encuentra en el artículo 27 de la Constitución Política de los Estados Unidos Mexicanos, que señala:

“Las aguas del subsuelo pueden ser libremente alumbradas mediante obras artificiales y apropiarse por el dueño del terreno; pero cuando lo exija el interés público o se afecten otros aprovechamientos, el Ejecutivo Federal podrá reglamentar su extracción y utilización y aún establecer zonas vedadas, al igual que para las demás aguas de propiedad nacional”.

El principio que permite la reglamentación de aguas del subsuelo se encuentra en el artículo 27, párrafo quinto, de la Constitución Política de los Estados Unidos Mexicanos:





“... pero cuando lo exija el interés público o se afecten otros aprovechamientos, el Ejecutivo Federal podrá reglamentar su extracción y utilización y aún establecer zonas vedadas, al igual que para las demás aguas de propiedad nacional”.

De esta manera, el estado, aunque establece el libre alumbramiento de las aguas del subsuelo, en la práctica ocurre que se reserva dicho alumbramiento, al través de los permisos para la extracción de aguas del subsuelo y establecimiento de zonas de veda, las que se encuentran establecidas prácticamente en todo el territorio nacional”.

Dentro de este complejo contexto hidrológico, reconociendo que no puede haber un desarrollo sustentable si no hay una gestión adecuada de los recursos hídricos, que incluya limitaciones a su extracción y propicie su distribución armónica entre sectores, en abril del año 2013, el Gobierno Federal adoptó la enérgica medida de suspender temporalmente el libre alumbramiento en todo el país, acción que fue el punto de partida para el establecimiento de los ordenamientos particulares –vedas, reglamentos o reservas– que sean pertinentes en cada caso.

La suspensión del libre alumbramiento y la emisión de los subsecuentes ordenamientos particulares no frenará el desarrollo; por el contrario, contribuirá a que éste sea sustentable, al estar basado en los volúmenes renovables del recurso hídrico, en lugar de que sea aparente y temporal por estar basado en una extracción libre e ilimitada a costa de una reserva finita del mismo. Tampoco afectará a los usuarios establecidos en las zonas que fueron de libre alumbramiento, sino que reconocerá y adecuará sus extracciones de agua, de tal manera que sean sustentables.

## Ley de energía geotérmica

Publicada en el Diario Oficial de la Federación de fecha 11 de agosto de 2014, se mencionan los aspectos importantes:

Capítulo I. “Disposiciones generales”:

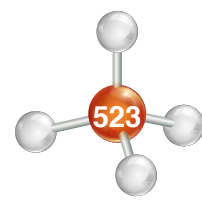
**Artículo 1.-** La presente Ley es de interés y orden público, y tiene por objeto regular el reconocimiento, la exploración y la explotación de recursos geotérmicos para el aprovechamiento de la energía térmica del subsuelo dentro de los límites del territorio nacional, con el fin de generar energía eléctrica o destinarla a usos diversos.

**Artículo 2.-** Para efectos de esta Ley, conceptos en los que se entiende por:

I. Agua geotérmica: Agua propiedad de la Nación, en estado líquido o de vapor que se encuentra a una temperatura aproximada o superior a 80 °C en forma natural en un yacimiento geotérmico hidrotermal, con la capacidad de transportar energía en forma de calor, y que no es apta para el consumo humano;

II. Área geotérmica: Área delimitada en superficie y proyectada en el subsuelo con potencial de explotación del recurso geotérmico;

III. Concesión: Acto jurídico por el cual el Estado, a través de la Secretaría, confiere a un particular, a la Comisión Federal de Electricidad o a las empresas productivas del Estado, los derechos para la explotación de los recursos geotérmicos de un área determinada, conforme a lo dispuesto en esta Ley, su Reglamento y demás disposiciones aplicables, con el propósito de generar energía eléctrica o para destinarla a usos diversos;







XIV. Yacimiento geotérmico: La zona del subsuelo compuesta por rocas calientes con fluidos naturales, cuya energía térmica puede ser económicamente explotada para generar energía eléctrica o en diversas aplicaciones directas;

XV. Yacimiento geotérmico hidrotermal: Formación geológica convencionalmente delimitada en extensión superficial, profundidad y espesor que contiene agua geotérmica, a alta presión y temperatura aproximada o mayor a 80 °C, confinados por una capa sello impermeable y almacenados en un medio poroso o fracturado,

### De los Permisos de Exploración

**Artículo 17.-** Los permisos para la exploración de áreas con potencial geotérmico tendrán una extensión de hasta 150 km<sup>2</sup>, una vigencia de tres años y podrán ser prorrogados por única vez, por tres años más, siempre y cuando se haya cumplido con los términos y condiciones del permiso y con las disposiciones de esta Ley y su Reglamento. La solicitud de prórroga deberá presentarse ante la Secretaría, seis meses antes de que concluya la vigencia del permiso correspondiente.

La Secretaría resolverá sobre el otorgamiento de la prórroga a que alude el párrafo anterior, en los siguientes quince días hábiles, contados a partir de la fecha en que se presentó la solicitud correspondiente.

**Artículo 23.-** Los permisionarios estarán obligados a:

II. Tratándose de yacimientos geotérmicos hidrotermales, a reinyectar el agua geotérmica al yacimiento del cual fue extraído, con el objeto de mantener el carácter renovable del recurso;

### Disposiciones aplicables a los permisos y concesiones

**Artículo 32.-** Las concesiones geotérmicas confieren derecho a:

I. Realizar obras y trabajos de exploración y de explotación dentro del área geotérmica que amparen;

II. Disponer del recurso geotérmico que se obtenga para la generación de energía eléctrica o destinarla a usos diversos que resulten aplicables;

### De la terminación, revocación y caducidad de los permisos y de las concesiones

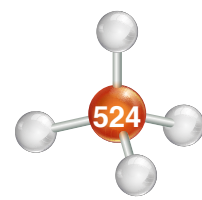
**Artículo 38.-** Los permisos y las concesiones se podrán revocar, a juicio de la Secretaría, tomando en consideración la gravedad del incumplimiento, cuando los titulares actualicen alguna de las causales siguientes:

V. Cuando, derivado de los trabajos de exploración o explotación de yacimientos geotérmicos, se dañe o contamine un acuífero adyacente y no se dé aviso a la Secretaría, ni se tomen las medidas pertinentes para remediar el daño. Lo anterior, con independencia de las sanciones administrativas y penales que conforme a las leyes resulten aplicables;

IX. Provoquen un daño irreparable al yacimiento geotérmico objeto del permiso o concesión;  
Otras Disposiciones.

**Artículo 48.-** Cuando los recursos geotérmicos incluidos en las áreas geotérmicas correspondientes a una concesión se extiendan a otras áreas geotérmicas también objeto de concesión cuyo titular sea distinto, se podrá convenir entre las partes el desarrollo de actividades de explotación de recursos geotérmicos conjuntas, previa autorización de la Secretaría.

**Artículo 49.-** En los casos en que la Secretaría lo estime conveniente, se podrá determinar la obligación de celebrar el convenio previsto en el artículo anterior, a efecto de evitar daños a





terceros, de hacer prevalecer criterios de seguridad nacional, interés público, eficiencia en el aprovechamiento de los recursos geotérmicos y protección al medio ambiente.

### De la información del subsuelo nacional

**Artículo 53.-** Los particulares, la Comisión Federal de Electricidad y las empresas productivas del Estado que realicen trabajos de exploración de áreas con posible potencial geotérmico, deberán entregar la información geológica, de percepción remota, la derivada de los muestreos geoquímicos, geofísicos, geohidrológicos, toma y análisis de muestras de rocas, y demás que haya sido obtenida en la etapa de exploración de terrenos con posible potencial geotérmico a la Secretaría, la cual será responsable del acopio, resguardo y administración de dicha información.

La información a que se refiere el párrafo anterior tendrá el carácter de reservada durante el período de vigencia del permiso o concesión de que se trate; sin embargo, dicha información pasará a ser pública cuando el permisionario o concesionario, según sea el caso, actualice alguna de las causales de terminación, revocación o caducidad previstas en esta Ley.

### Reglamento de la ley de energía geotérmica

Publicada en el Diario Oficial de la Federación de fecha 31 de octubre de 2014, se destacan los elementos más importantes.

#### CAPÍTULO I. Disposiciones Generales

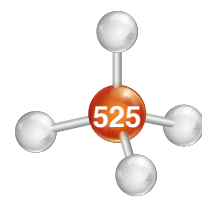
**Artículo 1.** El presente ordenamiento tiene por objeto establecer los requisitos, procedimientos y demás actos que permitan la realización de las actividades de Reconocimiento, Exploración y Explotación de Recursos Geotérmicos previstas en la Ley de Energía Geotérmica, para el aprovechamiento de la energía térmica del subsuelo dentro de los límites del territorio nacional, con el fin de generar energía eléctrica o destinarla a usos diversos.

**Artículo 14.** Para efectos del artículo 56 de la Ley, los Permisarios o Concesionarios deberán designar como responsable del cumplimiento de las normas de seguridad en las Áreas Geotérmicas a un ingeniero que cuente con cédula profesional y experiencia en temas relacionados con seguridad industrial.

Los Permisarios y Concesionarios serán responsables de mantener sus pozos en condiciones operativas y con las instalaciones necesarias para garantizar su estabilidad y seguridad.

**Artículo 35.** El programa de desarrollo de Explotación contendrá al menos lo siguiente:

- I. Descripción de los pozos productores que se pretenden perforar, así como los métodos, técnicas y el equipo con el que se propone desarrollar el Área Geotérmica solicitada;
- II. Pruebas de producción, las cuales deberán contener la medición que se realice de las toneladas de vapor por hora que se extraen de los pozos productores;
- III. Informe de evaluación del potencial geotérmico del Área Geotérmica solicitada y predicción del comportamiento del Yacimiento Geotérmico;
- IV. Información del estudio realizado en la etapa de Exploración que determine la existencia del Recurso Geotérmico, y
- V. Cronograma de trabajo y financiero a realizar durante la etapa de Explotación del Área Geotérmica.





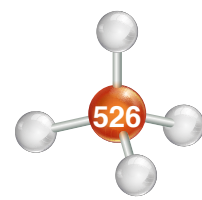
**Artículo 63.** Los informes técnicos a que se refieren los artículos 18, 20 y 34 fracción VII de la Ley, deberán entregarse a la Secretaría dentro de los primeros treinta días hábiles del siguiente año inmediato, detallando las obras y trabajos desarrollados para la Exploración. Dicho informe deberá contener lo siguiente:

- I. Período por comprobar;
- II. La información geológica obtenida de las actividades de exploración geotérmica;
- III. Los datos de producción anual o semestral, según sea el caso, citando las toneladas de vapor extraídas, y de energía eléctrica generada, en caso de Concesiones;
- IV. Levantamiento geológico, geohidrológico, geofísico y geoquímico a detalle del Área Geotérmica permitida o concesionada;
- V. En su caso, descripción de resultados del ensayo y análisis químico de las sustancias encontradas;
- VI. Cuantificación y clasificación de las reservas geotérmicas encontradas;
- VII. Plano de localización y descripción de las obras realizadas en el periodo;
- VIII. Situación del Área Geotérmica antes de iniciar las obras y trabajos del año correspondiente;
- IX. Descripción general del avance de obras y trabajos ejecutados conforme al cronograma de trabajo presentado ante la Secretaría en la solicitud correspondiente;
- X. Los resultados obtenidos a partir de las obras y trabajos a que se refiere la fracción anterior en materia de geología, geohidrología, geofísica y geoquímica, la cual deberá estar debidamente soportada con la siguiente información:
  - a) La geológica, a través de: planos geológicos, secciones geológicas, bloques diagramáticos, columna estratigráfica, análisis petrográficos y de alteración hidrotermal de las diferentes formaciones que afloran en el Área Geotérmica;
  - b) La percepción remota con imágenes de satélite en bandas ultravioleta, visible, infrarrojas y de radar;
  - c) Derivada de muestreos geoquímicos con química del agua de todas las captaciones de agua subterránea existentes en la zona de interés que incluya marcadores geotermométricos;
  - d) Derivada de estudios geofísicos, a través de: registros de los pozos disponibles al menos con las curvas de resistividad, potencial natural y gama; levantamientos de resistividad, gravimétricos, electromagnéticos y sísmicos, y
  - e) Derivada de muestreos geohidrológicos, a través de: medición de parámetros físico-químicos y la piezometría de la zona de interés elaborada con la información de los alumbramientos.

### **NORMA Oficial Mexicana NOM-150-SEMARNAT-2006**

Que establece las especificaciones técnicas de protección ambiental que deben observarse en las actividades de construcción y evaluación preliminar de pozos geotérmicos para exploración, ubicados en zonas agrícolas, ganaderas y eriales, fuera de áreas naturales protegidas y terrenos forestales.

Publicada el en Diario Oficial de la Federación de fecha 2 de marzo de 2007. CONSIDERANDO, Que el desarrollo del país requiere la ampliación de la planta productora de energía eléctrica y





que la instalación de sistemas geotermoeléctricos son una opción, por ser su producción constante en el tiempo y con una inversión menor que los sistemas convencionales.

Que actualmente existe un potencial en México de 1 500 MW en campos geotérmicos por desarrollar.

Que la energía geotérmica es una alternativa para disminuir el consumo de combustibles fósiles en la generación de energía eléctrica y un aporte importante para solucionar los problemas de energía eléctrica.

Que la selección del sitio para su exploración está determinada por la presencia de yacimientos geotérmicos, así como por las características geotécnicas del sitio y por la demanda de energía eléctrica.

Que aun cuando la construcción de pozos geotérmicos puede ocasionar impactos sobre el medio ambiente, es posible prevenirlos y controlarlos debido a las características similares que estas actividades presentan, siempre que éstas se realicen en estricto apego a las especificaciones técnicas de protección al ambiente y medidas preventivas y de mitigación que incorpora la presente Norma Oficial Mexicana.

Que para realizar la adecuada selección, exploración y preparación de los sitios destinados para la perforación se deberán realizar previamente los estudios de exploración superficial (geológicos, geofísicos, geoquímicos, entre otros) para definir el modelo de campo geotérmico; actividades que no tienen impactos en el medio ambiente, por lo que no se integran en la presente Norma Oficial Mexicana.

## 0. Introducción

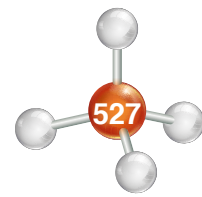
La geotermia es el calor o energía térmica que proviene del interior de la Tierra, que al ser transportada a la superficie por la roca o fluidos da origen a los sistemas geotérmicos. Es una fuente de energía renovable relacionada con volcanes, géisers, aguas termales y zonas tectónicas geológicas.

El proceso de exploración de pozos geotérmicos se inicia con la selección del área de interés, una vez que se han hecho los estudios de riesgo volcánico y de posibles deslizamientos de tierra para realizar la obra de ingeniería.

El propósito de la exploración geotérmica es definir tamaño, forma y estructura del yacimiento, y determinar características como son: tipo de fluido, temperatura, composición química y su capacidad para producir energía. Estas características pueden ser determinadas por exploración superficial y con perforaciones exploratorias posteriores.

Una vez que se tiene el modelo preliminar del campo con los datos superficiales, se sitúa un número reducido de pozos exploratorios, con los cuales se pretende corroborar los modelos y justificar los gastos de exploración.

La energía geotérmica se considera una energía limpia si se toman algunas medidas para su explotación. Durante el proceso de construcción de pozos exploratorios y evaluación preliminar de éstos, se pueden ocasionar diversas afectaciones al ambiente. En este sentido, resulta necesario establecer medidas adecuadas para estas actividades a fin de prevenir, controlar y mitigar los impactos ambientales que éstas puedan producir, principalmente en lo que se refiere al manejo de residuos, así como para la protección de los mantos freáticos, cuerpos superficiales de agua, la flora y fauna silvestres, suelo y subsuelo y calidad del aire.





## 1. Objetivo y campo de aplicación

La presente Norma Oficial Mexicana establece las especificaciones técnicas de protección al ambiente que deben observar los responsables de realizar actividades de construcción de pozos geotérmicos para exploración hasta su evaluación preliminar, que se ubiquen en zonas agrícolas, ganaderas y eriales, fuera de Áreas Naturales Protegidas y terrenos forestales y es de observancia obligatoria.

4.2.3 Se deben tomar las medidas preventivas a fin de no afectar el nivel del manto freático y las condiciones hidrológicas de la región. Para ello se debe instalar la tubería de conducción a 5 m y la superficial, la de anclaje y la de producción, a las profundidades que se determine de acuerdo con el análisis de la información geológica que se vaya obteniendo.

4.2.4 Las dimensiones mínimas para la construcción de la plataforma de perforación, deben estar determinadas por el tamaño del equipo de perforación a utilizar y por la topografía de la zona seleccionada a perforar. Cuando por las características del terreno sea necesario efectuar rellenos, éstos se deben compactar para evitar arrastres de material. El área de la plataforma no debe exceder de 80 m de ancho x 100 m de largo, más el área de la presa de lodos que no debe exceder de 625 m<sup>2</sup>.

4.2.5 En la preparación del terreno y con apego al proyecto de ingeniería se deben realizar las excavaciones, nivelaciones y rellenos que consideren las obras de drenaje pluvial para evitar la acumulación de agua, dándoles mantenimiento para evitar su deterioro.

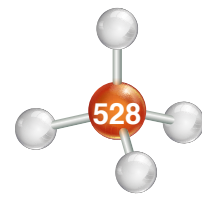
4.2.6 El material generado por los trabajos de nivelación del terreno y excavación se debe utilizar en la construcción de la plataforma, para evitar la creación de barreras físicas que impidan el libre desplazamiento de la fauna a los sitios aledaños a éste, y/o bordos que modifiquen la topografía e hidrodinámica de terrenos inundables, así como el arrastre de sedimentos a los cuerpos de agua cercanos a la zona del proyecto.

4.2.7 Se deben compactar e impermeabilizar las áreas donde se instalarán los equipos de perforación, presas de lodos y tanques de almacenamiento, para evitar que se infiltren contaminantes que pudieran verterse sobre el suelo. La impermeabilización debe realizarse por medio de una lona plastificada impermeable, con resistencia de la trama a la ruptura de 30 kgf/cm y al rasgado de trama de 41 kgf, confeccionada con bastilla doble y ojillos a cada metro; así como resistente al ataque químico, a la temperatura del fluido y a las sustancias para las cuales se impermeabiliza; o por medio de otra tecnología con resultados equivalentes o superiores, en cuyo caso debe contarse con los resultados de las pruebas que así lo demuestren.

## Ley de aguas nacionales

**Artículo 18.** Las aguas nacionales del subsuelo podrán ser libremente alumbradas mediante obras artificiales, salvo cuando por causas de interés o utilidad pública el Titular del Ejecutivo Federal establezca zona reglamentada, de veda o de reserva o bien suspenda o limite provisionalmente el libre alumbramiento mediante Acuerdos de carácter general.

El Ejecutivo Federal, a propuesta de “la Comisión”, emitirá la declaratoria de zonas reglamentadas, de veda o de reserva, deslindando, cuando así se requiera, la aplicación de las disposiciones que se establezcan para acuíferos definidos por “la Comisión”, en relación con otros acuíferos o yacimientos geotérmicos hidrotermales que existan en la misma zona geográfica. Para ello, “la Comisión” deberá realizar, por sí o con el apoyo de terceros cuando resulte conveniente, los estudios y evaluaciones suficientes para sustentar los deslindamientos referidos y promover el mejor aprovechamiento de las fuentes de aguas del subsuelo.







**Artículo 81.** Los interesados en realizar trabajos de exploración con fines geotérmicos, deberán solicitar a “la Comisión” permiso de obra para el o los pozos exploratorios, en términos de lo dispuesto por la Ley de Energía Geotérmica y su Reglamento.

La explotación, uso y aprovechamiento de aguas del subsuelo, contenidas en yacimientos geotérmicos hidrotermales, requiere de concesión de agua otorgada por “la Comisión” y de autorización en materia de impacto ambiental.

Las concesiones de agua a que alude el párrafo anterior serán otorgadas de conformidad con los requisitos establecidos en la Ley de Energía Geotérmica y su Reglamento. En todo caso, la dependencia ante la cual se realizarán los trámites relativos a su otorgamiento y modificación, será la que señala el artículo 2 fracción XVI de la Ley de Energía Geotérmica.

Como parte de los requisitos que establece la Ley de Energía Geotérmica y su Reglamento para el otorgamiento de concesiones de agua, el interesado deberá presentar a la dependencia a que alude el párrafo anterior, los estudios del yacimiento geotérmico hidrotermal que determinen su localización, extensión, características y conexión o independencia con los acuíferos adyacentes o sobreyacentes.

Los estudios y exploraciones realizados por los interesados deberán determinar la ubicación del yacimiento geotérmico hidrotermal con respecto a los acuíferos, la probable posición y configuración del límite inferior de éstos, las características de las formaciones geológicas comprendidas entre el yacimiento y los acuíferos, entre otros aspectos.

Si los estudios demuestran que el yacimiento geotérmico hidrotermal y los acuíferos sobreyacentes no tienen conexión hidráulica directa, el otorgamiento de la concesión de agua por parte de “la Comisión”, no estará sujeta a la disponibilidad de agua de los acuíferos ni a la normatividad relativa a las zonas reglamentadas, vedas y reservas, respectivas.

“La Comisión” otorgará al solicitante, a través de la dependencia a que la alude la fracción XVI del artículo 2 de la Ley de Energía Geotérmica, la concesión de agua correspondiente sobre el volumen de agua solicitado por el interesado y establecerá un programa de monitoreo a fin de identificar afectaciones negativas a la calidad del agua subterránea, a las captaciones de la misma o a la infraestructura existente derivadas de la explotación del yacimiento.

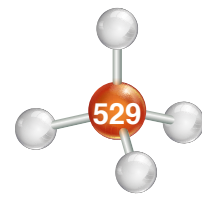
Se requerirá permiso de descarga y autorización en materia de impacto ambiental cuando el agua de retorno se vierta a cuerpos receptores que sean aguas nacionales y demás bienes nacionales o cuando se trate de la disposición al subsuelo de los recortes de perforación. La reincorporación del agua de retorno al yacimiento geotérmico hidrotermal, requiere permiso de obra para el pozo de inyección.

Las concesiones de agua otorgadas por “la Comisión”, podrán ser objeto de modificación en caso de alteración de los puntos de extracción o inyección, redistribución de volúmenes, relocalización, reposición y cierre de pozos.

## Reglamento de la ley de aguas nacionales

### Uso en Generación de Energía Eléctrica

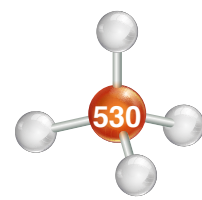
**Artículo 118.-** “La Comisión”, en los términos del artículo 22 de la “Ley” y del presente “Reglamento” podrá hacer la reserva necesaria para concesionar mediante concurso y en los términos del artículo 40 de este “Reglamento”, el aprovechamiento de aguas nacionales para usos múltiples, incluida la generación de energía eléctrica, para lo cual publicará la reserva de agua respectiva.





**Artículo 126.-** El uso de agua en estado de vapor para la generación de energía eléctrica y el uso de agua para enfriamiento, se considerará uso industrial.

XXI. Uso industrial: la utilización de agua nacional en fábricas o empresas que realicen la extracción, conservación o transformación de materias primas o minerales, el acabado de productos o la elaboración de satisfactores, así como la que se utiliza en parques industriales, en calderas, en dispositivos para enfriamiento, lavado, baños y otros servicios dentro de la empresa, las salmueras que se utilizan para la extracción de cualquier tipo de sustancias y el agua aún en estado de vapor, que sea usada para la generación de energía eléctrica o para cualquier otro uso o aprovechamiento de transformación





# Apéndice D

## Diagramas de fase para sistemas silicatados

Recopilado por Carlos Heinrich Schulze Schreiber.

### D. I Reglas de Goldschmidt y Ringwood.

Estas reglas son importantes para aquellos diagramas con solución sólida. Goldschmidt V. M. (1937) desarrollo estos principios para entender la geoquímica de los elementos mayores que se sustituyen entre sí y los traza que ocurren en los minerales.

- 1) Cuando dos átomos muestran un radio iónico idéntico y la misma carga, ambos pueden sustituir uno al otro en la misma posición dentro de la red cristalina. Cuando un elemento menor muestra las mismas características iónicas y sustituye a un elemento mayor y toma la misma posición en la red cristalina del mineral, se conoce con el nombre de "diadogia".
- 2) Si dos átomos muestran radios iónicos similares y la misma carga, el más pequeño preferentemente se posiciona en la red cristalina del mineral durante su cristalización temprana y entra en la posición del elemento que sustituye. El radio no debe de exceder más de 15%.
- 3) Si dos átomos muestran un radio iónico similar pero su carga es diferente, el ion con mayor carga se concentrará preferentemente durante la cristalización temprana del mineral y entra en la posición del elemento que sustituye. El elemento con mayor carga forma un enlace más fuerte.
- 4) Ringwood (1955) observó, que las reglas de Goldschmidt se aplican muy bien en los silicatos que presentan un enlace covalente. Ringwood propone tomar en cuenta la electronegatividad de un elemento que sustituye uno al otro y se corrige la diferencia de la fuerza de enlace entre los elementos.
- 5) Si dos elementos muestran un radio iónico similar con la misma carga, aquel con menor electronegatividad preferentemente se concentrará en el mineral en sus etapas tempranas de formación o sustituye a otro con mayor electronegatividad. La diferencia de electronegatividad entre los elementos no debe de ser mayor de 0.1.

### D.II. Solución sólida binaria compleja y solución sólida compartida

A- Solución sólida "SS" binaria completa.

Catión

Ejemplo:

Olivino:  $(\text{Mg,Fe})_2\text{SiO}_4$

Miembros extremos  $\text{Fe} \leftrightarrow \text{Mg}$  al bajar la temperatura.

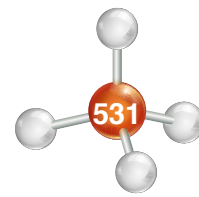
Forsterita (Fo):  $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$

Fayalita (Fa):  $\text{Fe}_2\text{SiO}_4$

Carbonatos:  $(\text{Mn,Fe})\text{CO}_3$

Siderita (Sid):  $\text{FeCO}_3$

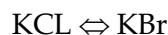
Rodocrosita (Rod):  $\text{MnCO}_3$



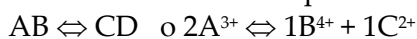


Anión

Ejemplo:

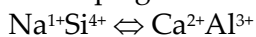


B- Solución sólida compartida.



Ejemplo:

En las plagioclasas:

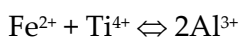


Albita (Ab):  $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$

Anortita (An):  $\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$

Ejemplo:

En la estructura del corindón en el zafiro:



### D. III. Sistema en tránsito

Estado no estacionario donde las variables de un sistema cambian durante su evolución desde el inicio hasta su fin (en la naturaleza un sistema siempre se va a encontrar en tránsito).

### D. IV. Abreviaciones

Wt%: porcentaje peso

P: presión

Kbar: unidad de presión. kilo:  $10^3$  bar y 1 bar =  $10^6$  dyne  $\text{cm}^{-2}$  =  $10^5$  Pa

T: temperatura

TRL: tierras raras ligeras

TRP: tierras raras pesadas

L: líquido

S: sólido

V: vapor

$\rho$ : densidad

F: fase (para la regla de las fases)

GL: grados de libertad.

C: componente (para la regla de las fases)

X: composición

$X_L$ : composición del líquido

$X_s$ : composición del sólido

$X^{T=1425}$ : composición a una temperatura dada ( $1425^\circ\text{C}$ )

Ab: albita

An: anortita

Di: diósida

En: enstatita

Fo: forsterita

Kfs: feldespato potásico

Lc: leucita

Ol: olivino

Pl: plagioclasa

Pro: piropero

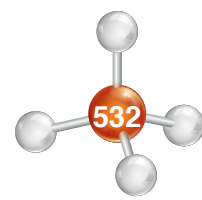
Q: cuarzo

Trd: tridimita.

Ei: eutéctico, punto invariante o punto triple.

P: punto peritético

SS: Solución sólida





### ***CREATIVIDAD E INNOVACIÓN EN INGENIERÍA***

---

se publicó digitalmente en el repositorio de la Facultad de Ingeniería en diciembre del de 2022. Primera edición electrónica de un ejemplar (58 MB) en formato PDF.

El cuidado de la edición y diseño estuvieron a cargo de la Unidad de Apoyo Editorial de la Facultad de Ingeniería.

