

# Índice analítico

## CAPÍTULO 1.

### EL ÁTOMO. ESTRUCTURA ATÓMICA. LA CLASIFICACIÓN PERIÓDICA DE LOS ELEMENTOS

#### 1.1. Constituyentes fundamentales del átomo, 3

Tabla 1. Tabla de masas atómicas relativas, 4

#### 1.2. Parámetros característicos de las capas electrónicas. Números cuánticos $n, l, m, s$ , 5

a) Número cuántico principal,  $n$ , 5

b) Otros números cuánticos:

1.º Número cuántico secundario  $l$ . 2.º Número cuántico magnético  $m$ .

3.º Número cuántico del spin  $s$ , 7

$\alpha$ ) Principio de exclusión de Pauli, 7

$\beta$ ) Principio de estabilidad, 8

$\gamma$ ) Regla de Hund, 8

$\delta$ ) Regla de Klechkowsky, 8

Tabla 1.1. Construcción de los átomos, 8

#### 1.3. Clasificación periódica. Ley de Moseley. Propiedades generales de las familias de elementos, 9

Tabla 1.2. Tabla periódica de los elementos, 13

#### 1.4.\* La estructura electrónica de los átomos desde el punto de vista de la mecánica ondulatoria. Ecuación de Schrödinger. Principio de incertidumbre de Heisenberg. Orbitales atómicos, 14

1.4. a) Modelos vectoriales del electrón y del átomo. Momentos magnéticos. Paramagnetismo, 18

Tabla 1.3. Funciones de onda  $\Psi_{n, l, m}$  para el átomo de hidrógeno y los hidrogenoides, 19

1.4. b) Funciones de distribución radiales y angulares. Orbitales atómicos, 22

1.4. c) Ejemplos de determinación de  $\Psi$ : caso del electrón  $1s$  del átomo de hidrógeno, 25

## CAPÍTULO 2.

**EL EDIFICIO QUÍMICO.  
EDIFICIOS METÁLICOS, IÓNICOS  
Y COVALENTES. COMPUESTOS  
DE COORDINACIÓN.  
ASOCIACIONES MOLECULARES**

- 2.1. Estereoquímica de los edificios químicos. Sistemas cristalinos. Redes cristalinas, 29**  
 Tabla 2.1. Sistemas cristalinos, 29  
 Tabla 2.2. Distribuciones en redes Bravais, 31
- 2.2. Estereoquímica de los metales puros. Estructuras C.I., C.F. y H.C., 32**  
 2.2. a) Estructura C.F., 33  
 2.2. b) Estructura H.C., 34  
 2.2. c) Estructura C.I., 35
- 2.3. Volumen atómico. Radio atómico, 36**  
 Tabla 2.3. Radios atómicos de los metales [ $\text{Å}$ ] (coordinación 12), 36
- 2.4. Aleaciones. Constitución de algunas aleaciones binarias. Soluciones sólidas de sustitución (Cu-Ni). Soluciones sólidas de inserción (Pd-H<sub>2</sub>). Compuestos intermetálicos (siliciuro de magnesio), 37**  
 2.4. a) Soluciones sólidas de sustitución. Ejemplo: Cu-Ni, 37  
 2.4. b) Soluciones sólidas de inserción. Ejemplo: Pd-H<sub>2</sub>, 38  
 1.º Intersticios. 2.º Intersticio tetraédrico, 38  
 2.4. c) Compuestos intermetálicos (siliciuro de magnesio), 41  
 Regla de Hume-Rothery: Compuestos «electrónicos», 41
- 2.5. Propiedades mecánicas puestas en evidencia mediante ensayos de tracción. Interpretaciones estructurales simples, 43**  
 2.5. a) Textura de los metales, 43  
 2.5. b) Diagrama de tracción de un monocristal, 43  
 2.5. c) Diagrama de tracción de un metal policristalino equiáxico, 44
- 2.6. Interacciones y edificios iónicos, 45**  
 2.6. a) Ionización por captura o pérdida de electrones. Ejemplos: NaCl, MgO, 45  
 α) Iones de estructura electrónica externa de gas raro  $ls^2$  o  $ns^2 np^6$ , 46  
 β) Iones cuya capa externa es  $ns^2$ , 46  
 γ) Iones en cuya capa exterior hay 18 electrones:  $ns^2 np^6 nd^{10}$ , 46  
 δ) Iones cuya capa superficial es incompleta o iones de transición, 46  
 2.6. b) Realidad física de los iones: Volumen, radio iónico, polarizabilidad, 47  
 Tabla 2.4 a, b. Radios iónicos, 49, 50  
 Tabla 2.5. Polarizabilidades de algunos iones y moléculas, 51

- 2.6. c) Estereoquímica de los edificios iónicos. Principales ejemplos: CsCl, NaCl, ZnO, Mg(OH)<sub>2</sub>, 51
- α) Compuestos iónicos C.A.: Índices de coordinación 8-8 Tipo: cloruro de cesio CsCl, 52  
Tabla 2.6. Ejemplos de compuestos con estructura tipo CsCl, 53
- β) Compuestos iónicos C.A.: Índice de coordinación 6-6. Tipo: cloruro sódico NaCl, 53  
Tabla 2.7. Valores de  $x = r_-/r_+$  para los halogenuros alcalinos, 55
- γ) Compuestos iónicos C.A.: Índices de coordinación 4-4. Tipos: blenda ZnS y wurtzita ZnS, 55  
1.º Tipo blenda: ZnS, 55  
2.º Tipo wurtzita: ZnS, 57
- δ) Compuestos iónicos C.A.<sub>2</sub>: Estructuras con índices de coordinación 8-4 (fluorita). Índices de coordinación 6-3 (rutilo). Índices de coordinación 4-2 (cristobalita). Redes laminares C.A.<sub>2</sub>. Tipo CdI<sub>2</sub> o Mg(OH)<sub>2</sub> o C.A.: Tipo NiAs. Tendencia a la estructura molecular, 60  
1.º Índices de coordinación 8-4: estructura tipo fluorita CaF<sub>2</sub> (y antfluorita K<sub>2</sub>O), 60  
2.º Índices de coordinación 6-3: estructura tipo rutilo TiO<sub>2</sub>, 61  
3.º Índices de coordinación 4-2: estructura tipo cristobalita β SiO<sub>2</sub>, 62  
4.º Estructuras laminares: estructuras CdCl<sub>2</sub>, CdI<sub>2</sub> y Mg(OH)<sub>2</sub>, estructura NiAs. Evolución hacia la estructura molecular, 63  
5.º Estructura de los óxidos mixtos del tipo espinela, 65
- 2.6. d) Teoría del enlace iónico. Energía reticular. Ciclo de Born-Haber, 66  
α) Energía de ionización y potencial de ionización, 68  
β) Afinidad electrónica, 69  
Tabla 2.8. Potenciales de ionización  $V_i$  de algunos átomos comunes A en volts, 70

## 2.7. Edificios covalentes, 71

- 2.7. a) Teoría de los orbitales moleculares (T.O.M.), 74
- 2.7. b) Niveles de energía de los orbitales moleculares. Diagramas de las energías relativas de los O.M., 76
- 2.7. c) Principio de construcción de los O.M. Orden de un enlace. Longitud de un enlace. Energía de enlace, 79
- 2.7. d) Moléculas diatómicas homonucleares de los elementos del segundo período de la clasificación periódica, 80
- 2.7. e) Moléculas diatómicas homonucleares de los otros períodos de la clasificación periódica. Comparaciones dentro de una misma familia, 87

- 2.7. f) Moléculas diatómicas heteronucleares AB:  $A \neq B$ , 88
- 1.º Electronegatividad, 88
  - 2.º Momento dipolar de las moléculas, 89  
Tabla 2.10. Electronegatividades de los elementos, 90
  - 3.º Estructuras de los O.M. de una molécula A-B diatómica heteronuclear, orbitales atómicos híbridos, 92.
- 2.7. g) Moléculas triatómicas lineales  $AX_2$ , 95
- α) Moléculas triatómicas lineales sin enlaces  $\pi$ : tipo  $BeH_2$ , 95
  - β) Moléculas triatómicas lineales con enlaces  $\pi$ : tipo  $CO_2$ , 98
- 2.7. h) Moléculas triatómicas no lineales: tipo  $OH_2$  y  $NO_2$ , 100
- 2.7. i) Moléculas tetraatómicas  $AX_3$ , 107
- α) Moléculas tetraatómicas planas: tipo  $BF_3$ , 107
  - β) Moléculas tetraatómicas piramidales: tipo  $NH_3$ , 110  
Tabla 2.11. Valores del ángulo de enlace  $\alpha$ , de la longitud de enlace l, de la energía de enlace A-X, y del momento dipolar  $\mu$  global de las moléculas  $AX_3$ , 114
- 2.7. j) Moléculas pentaatómicas: tipo  $CH_4$ , 115
- 2.7. k) Estructura de los alquenos, de los alquilos y del benceno, 118
- α) Estructura de los alquenos: tipo etileno  $C_2H_4$ , 118
  - β) Estructura de los alquinos: tipo acetileno  $C_2H_2$ , 121
  - γ) Estructura cíclica del benceno  $C_6H_6$ , 122
- 2.7. l) Enlaces covalentes de más de dos centros. Ejemplo: enlaces de tres centros tipo diborano  $B_2H_6$ , 126
- 2.7. m) La hibridación como fenómeno más general: Previsión cualitativa de las estructuras. Recapitulación. Reglas de Hefnerich, 129  
Tabla 2.12. Estructuras e hibridación, 130
- 2.7. n) Teoría del enlace químico de las repulsiones electrónicas (Linnett y Luder), 132
- 1.º Principios básicos, 132
  - 2.º Distribución tetraédrica de los electrones para los elementos del primer y del segundo período de la clasificación periódica, 132
  - 3.º Enlaces químicos. Representación de las moléculas y de los iones, 135
    - α) Formación de una molécula diatómica (o ion diatómico). Ejemplos:  $HF$ ,  $OH^-$  y  $F_2$ , 135
    - β) Formación de la molécula de oxígeno. Distribuciones electrónicas en el estado fundamental y en los estados «excitados», 136
    - γ) La molécula de nitrógeno y las moléculas diatómicas isoelectrónicas  $CO$ ,  $CN^-$ ,  $NO^+$  y  $C_2^{2-}$ , 137
  - 4.º Establecimiento de estructuras. Utilización de las cargas formales, 138

- 5.º Clasificación de los enlaces químicos en función del número de electrones que intervienen, 140
    - α) Enlaces de un solo electrón, 141
    - β) Enlaces por dos electrones, 143
    - γ) Enlaces por tres electrones, 144
    - δ) Enlaces por cuatro electrones, 146
    - ε) Enlaces por cinco electrones, 146
    - η) Enlaces por seis electrones, 147
  - 6.º Generalización de la representación tetraédrica. Representación, según Luder, de los átomos de los elementos de transición y de los lantánidos, 147
- 2.8. Cristales con redes moleculares (tipo: benceno sólido, dióxido de carbono sólido). Edificios macromoleculares covalentes (polietileno, grafito, diamante), 149**
- 1.º Redes de moléculas diatómicas. Radios de van der Waals, 150
  - 2.º Moléculas triatómicas: tipo  $\text{CO}_2$  «hielo seco», 150
  - 3.º Moléculas más complejas, 151
    - α) El azufre, selenio y telurio, 151
    - β) Carbono. Diamante y grafito. Estructuras de compuestos orgánicos cristalizados, 152
- 2.9. Asociaciones moleculares «enlace de hidrógeno», 156**
- 2.9. a) Sales con moléculas de agua y sales con moléculas de amoníaco, 157
  - 2.9. b) Ácidos con moléculas de agua. Ion oxonio  $\text{H}_3\text{O}^+$ , 158
  - 2.9. c) Fluoruro de hidrógeno HF, 158
    - Nota\*: Estructura del enlace «enlace por hidrógeno», 159
  - 2.9. d) Estructura lagunar del hielo. Clatratos, 160
  - 2.9. e) Alcoholes y ácidos orgánicos. Quelatos, 162
- 2.10\* Influencia de la forma del enlace sobre las propiedades físicas. Coexistencia de varios tipos de enlace en un mismo edificio, 164**
- 2.10. a) Propiedades térmicas, 164
    - Tabla 2.14. Características físicas de los halogenuros de sodio, 164
    - Tabla 2.15. Características físicas de los cloruros alcalinotérreos, 164
  - 2.10. b) Propiedades mecánicas, 166
  - 2.10. c) Propiedades eléctricas, 166
  - 2.10. d) Solubilidad. Energía de solvatación (de hidratación en el caso de las soluciones acuosas), 166
    - Tabla 2.16. Energías de hidratación de iones, 167
    - Tabla 2.17. Comparación entre  $-E(\text{AH}_{\text{hid}})$  y  $\text{AH}_{\text{sol}}$ , 168
    - Tabla 2.18. Solubilidad de los halogenuros alcalinos MX, 168

**2.11. Isomería, 169**

- 2.11. a) Isomería de constitución, 169
  - 1.º Isomería de cadena, 169
  - 2.º Isomería de posición, 170
  - 3.º Isomería funcional, 170
- 2.11. b) Isomería geométrica o isomería cis-trans, 171
- 2.11. c) Isomería óptica. Conformación. Isomería eritro-treo, 173

**2.12. Compuestos de coordinación, 178**

- 2.12. a) Evidencia experimental de la existencia de iones complejos: átomo central, enmascaramiento, ligandos (o coordinados), 178
- 2.12. b) Nomenclatura de los complejos de coordinación, 180
- 2.12. c) Isomería en los complejos, 181
  - 1.º Isomería de hidratación, 183
  - 2.º Isomería de ionización, 183
  - 3.º Isomería estructural o de sal, 183
  - 4.º Isomería de coordinación, 183
  - 5.º Estereoisomería, 184
    - α) Isomería cis-trans, 184
    - β) Isomería óptica, 186
- 2.12. d) Enlaces en los complejos de los metales de transición, 189
  - α) Teoría del enlace de valencia, 190
  - β) Teoría del campo cristalino, 192
    - 1.º Coordinación octaédrica, 192
      - Tabla 2.19. Distribución de los electrones *d* en los complejos octaédricos y energía de estabilización del campo cristalino  $W_s$ , 195
    - 2.º Coordinación tetraédrica, 196
      - Tabla 2.20. Comparación entre la energía de desdoblamiento  $\Delta_0$  y la energía  $W_u$  necesaria para aparear dos electrones, en un campo octaédrico, para determinar el «estado spin», 197
      - Tabla 2.21. Distribución de los electrones *d* en los complejos tetraédricos, 198
    - 3.º Coordinación cuadrada plana y complejos octaédricos deformados. Efecto Jahn-Teller, 199
    - 4.º Conclusión. Teoría del campo de los ligandos. Color de los complejos, 201
  - γ\*) Teoría de los orbitales moleculares aplicada a los complejos de los metales de la primera serie de transición, 202
    - 1.º Coordinación octaédrica. Ejemplo:  $[\text{Ti}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$ , 203
    - 2.º Coordinación cuadrada plana. Ejemplo:  $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ , 207

- 3.º Coordinación tetraédrica. Ejemplo:  $\text{VCl}_4$ , 209  
 Tabla 2.22. Energía de desdoblamiento orbital  $d$  para diversos complejos y diversas coordinaciones, 210

### 2.13. Observación, 212

## CAPÍTULO 3.

### LA REACCIÓN QUÍMICA

#### 3.1. Termoquímica. Principio del estado inicial y del estado final. Calores de reacción. Energía interna y entalpía, 215

- 3.1. a) Calor de reacción a volumen constante: variación de la energía interna  $U$ . Calor de reacción a presión constante: variación de la entalpía  $H$ , 215
- 3.1. b) Principio del estado inicial y del estado final (Hess. 1840), 216
- 3.1. c) Relación entre  $Q_p$  y  $Q_v$ , 216
- 3.1. d) Relación entre los calores de reacción y las capacidades caloríficas  $C_v$  y  $C_p$ . Variación de los calores de reacción con la temperatura: fórmula de Kirchhoff, 217  
 Tabla 3.1. Coeficientes  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , de la expresión del calor específico a presión constante  $C_p = a + bT + cT^2$ , para algunos gases, 218
- 3.1. e) Aplicaciones del principio del estado inicial y del estado final, 218
- 1.º Determinación de las entalpías de formación o de transformación que no son medibles directamente, 218
  - 2.º Energías de enlace, 219  
 Tabla 3.2. Energías de enlace, 222
  - 3.º Temperatura de llama «adiabática», 223
    - $\alpha$ ) A presión constante (inflamación al aire libre), 223  
 Tabla 3.3. Entalpías de formación de referencia (estándar), 224
    - $\beta$ ) A volumen constante, 225
  - 4.º Principio de las medidas de calores de reacción, 225
    - $\alpha$ ) A volumen constante, 225
    - $\beta$ ) A presión constante, 226
      - 1) Medida de un calor de neutralización ácido-base, 226
      - 2) Medida de un calor de combustión a presión constante, 226

#### 3.2. Equilibrios químicos, 226

- 3.2. a) Generalidades: Diversos tipos de equilibrios químicos, 226
- 3.2. b) Métodos experimentales para el estudio de los equilibrios homogéneos y heterogéneos. Sistemas que no están en equilibrio. «Temple» de los gases y de los sólidos, 227

- 1.º Medida de la presión total P: Determinación del coeficiente de disociación o del grado de avance de una reacción en sistemas que comprenden una fase gaseosa, 228
  - 2.º Medida de densidades de vapor, 230
  - 3.º Medida de las presiones parciales, 230
  - 4.º Medida de presiones de explosión, 230
  - 5.º Sistemas que no están en equilibrio. «Templado» de gases y de sólidos, 231
- 3.2. c) Variación de un sistema. Regla de las fases. Aplicación a los cambios de estado de las sustancias puras y de las mezclas binarias y a los sistemas químicos en equilibrio, 232
- 1.º Definiciones: fase, constituyentes o componentes, variación, 232
  - 2.º Aplicación a los cambios de estado de una sustancia pura, 234
  - 3.º Aplicación a las mezclas binarias, 234
- 3.2. d) Influencia de la concentración, de la presión y de la temperatura sobre los equilibrios en medio homogéneo. Ley de acción de masas. Fórmula de Van't Hoff, 235
- 1.º Ley de acción de masas o ley de Guldberg y Waage, 235
  - 2.º Otras fórmulas de la ley de acción de masas, 235
    - α) Expresión en función de las presiones parciales: caso de un sistema gaseoso, 235
    - β) Expresión en función de las fracciones molares, 235
    - γ) Expresión en función del número de moles, 236
  - 3.º Aplicación de la ley de acción de masas a sistemas heterogéneos, 236
  - 4.º Fórmulas de la isocora y la isobara de Van't Hoff, 237
  - 5.º Aplicación de las fórmulas precedentes al estudio de la influencia de la temperatura, de la presión y de la concentración. Leyes de «desplazamiento del equilibrio», 238
    - α) Influencia de la temperatura: ley de Van't Hoff, 238
    - β) Influencia de la presión: ley de Le Chatelier, 239
    - γ) Influencia de la concentración: Acción de un exceso de componente o acción de masa, 239
      - I. Acción de un componente inerte, 239
      - II. Acción de un componente reactivo: 1) A volumen constante. 2) A presión constante, 240
  - 6.º Caso de equilibrios monovariantes, 242
- 3.2. e) Aplicaciones a algunos ejemplos, 242
- 1.º Equilibrios homogéneos, 242
    - α) Disociación de los haluros de hidrógeno, 242
    - β) Disociación del pentacloruro de fósforo, 243
    - γ) Esterificación-hidrólisis, 244
  - 2.º Equilibrios heterogéneos, 245

- α) Disociación del carbonato cálcico, 245
  - I. Estudio experimental, 245
  - II. Estudio teórico: 1) Regla de las fases. 2) Ley de acción de masas, 246
- β) Disociación de sales que contienen moléculas de agua y de sales que contienen moléculas de amoníaco, 246

## CAPÍTULO 4.

**Estática química.** Ejercicios de los capítulos 1, 2 y 3, 249

Resumen de los ejercicios, 250

A) Enunciados de los ejercicios, 251

B) Soluciones abreviadas y resultados numéricos, 265

## CAPÍTULO 5.

### CINÉTICA QUÍMICA

**5.1. Introducción. Estudio experimental, 283**

**5.2. Cinética en medio homogéneo. Velocidad de reacción. Orden de una reacción, 283**

5.2. a) Velocidad de reacción. Definiciones, 283

5.2. b) Métodos experimentales de la cinética química, 285

1.º Métodos directos, 285

2.º Métodos indirectos, 285

5.2. c) Expresión de la velocidad de reacción en función de las molaridades. Orden de una reacción, 286

5.2. d) Cinética formal: integración de las ecuaciones de la velocidad, 287

1.º Reacciones de orden 1, 287

2.º Reacciones de orden 2, 288

3.º Reacciones de orden 3, 290

4.º Reacciones de orden cero, 290

5.º Degeneración del orden, 291

5.2. e) Determinación del orden de una reacción, 292

1.º Métodos de integración que emplean las funciones  $n$ ,  $a$ ,  $x$  y el tiempo de semi-reacción  $T$  que resulta de la integración de la ecuación de la velocidad postulada a priori, 292

2.º Métodos que emplean la ecuación de la velocidad sin integrar, 292

3.º Método gráfico que utiliza variables «reducidas» y permite construir un ábaco para la determinación del orden (Powell), 292

4.º Métodos que emplean una degeneración del orden global, 293

α) Método de aislamiento (Ostwald), 294

β) Método de las velocidades iniciales de reacción, 294

**5.3. Reacciones compuestas, 294**

- 5.3. a) Reacciones reversibles, 294
  - 1.º Reacción de orden 1 opuesta a una reacción de orden 1, 294
  - 2.º Reacción de orden 2 opuesta a una reacción de orden 1, 295
  - 3.º Reacción de orden 2 opuesta a una reacción de orden 2, 296
  - 4.º Método de relajación para la medida de las constantes de velocidad de reacciones reversibles muy rápidas (reacciones ácido-base, por ejemplo), 297
- 5.3. b) Reacciones paralelas, 298
- 5.3. c) Reacciones sucesivas, 298

**5.4. Influencia de la temperatura sobre la velocidad de reacción.****Ley de Arrhenius, 300**

- 5.4. a) Ley de Arrhenius, 300
- 5.4. b) Interpretación de la ley de Arrhenius. Teoría de los estados de transición (o del complejo activado) (Eyring), 300

**5.5. Mecanismo de reacción; nociones elementales: procesos complejos. Formas intermedias activas. Modos de activación. Reacciones en cadena. Iniciadores e inhibidores, 303**

- 5.5. a) Reacciones complejas, 303
  - 1.º Principios básicos de los mecanismos de las reacciones, 304
  - 2.º Formas intermedias activas: átomos, radicales libres... Modos de activación, 306
    - α) Rupturas de enlace homolíticas o heterolíticas, 307
    - β) Formación de complejos, 308
    - γ) Transferencia de la activación, 308
- 5.5. b) Reacciones en cadena. Iniciadores e inhibidores, 308
  - 1.º Principio del estado estacionario de Bodenstein, 308
  - 2.º Pasos de una reacción en cadena: iniciación, propagación, ruptura, 308
  - 3.º Ejemplos de reacciones complejas: Aplicación del principio del estado estacionario, 309
    - α) Reacciones complejas en las que interviene una única especie activa: descomposición del anhídrido nítrico  $N_2O_5$ , 309
    - β) Reacciones en cadena en la síntesis térmica de HBr:  $H_2 + Br_2 \rightarrow 2 HBr$ , 310
    - γ) Síntesis del agua: cadenas ramificadas, 312
- 5.5. c) Mecanismos de reacción en química orgánica: nociones elementales, 313
  - Ejemplos S.N. Hidrólisis de los derivados halogenados. Mecanismos S.N.1 y S.N.2, 314
    - α) Mecanismo S.N.2: derivados con carbono primario, 314

- β) Mecanismo S.N.1: derivados con carbono terciario, 314  
Ejemplos S.E.2: Efecto inductivo. Efecto mesómero (movilidad de los electrones  $\pi$ ). Reglas de Holleman de sustitución en el ciclo aromático, 315
- α) Halogenación; β) Nitración; γ) Sustituciones de Friedel y Crafts: alcoholación, acilación, CO + HCl, anhídrido de ácido, alcoholes y alquenos. Nitración, 316
- 1.º Efecto inductivo, 317
- 2.º Efecto mesómero, 317

## 5.6. Catálisis, 319

- 5.6. a) Definiciones, 319
- 5.6. b) Leyes de la catálisis verdadera, 321
  - 1.º El catalizador no aporta energía al sistema durante el paso del estado inicial al estado final, 321
  - 2.º El verdadero catalizador no es un iniciador ni un inhibidor de reacciones en cadena: Su acción es permanente, 321
  - 3.º El catalizador no actúa necesariamente en cantidades muy pequeñas, 322
- 5.6. c) Catálisis homogénea: mecanismos simples. Ejemplos. Catálisis ácido-básica, 322
  - 1.º Catálisis en medio homogéneo, 322
  - 2.º Ejemplos de catálisis homogéneo, 323
    - α) Catálisis de oxidación-reducción. Efecto promotor, 323
    - β) Catálisis ácido-básica, 324
- 5.6. d) Catálisis heterogénea, 326
  - 1.º Adsorción física y adsorción química, 327
  - 2.º Teoría aproximada de la adsorción: Isoterma de Langmuir, 327
  - 3.º Caracteres generales de la catálisis heterogénea, 329
  - 4.º Interpretación estructural de la actividad de los catalizadores heterogéneos, 330
    - α) Catalizadores conductores y semiconductores, 330
    - β) Catalizadores ácido-básicos que son aisladores, 331

## CAPÍTULO 6.

### APLICACIONES DE LA ESTÁTICA Y DE LA CINÉTICA A ALGUNOS SISTEMAS REACCIONANTES

- 6.1. Generalidades. Sistemas industriales de flujo continuo. Rendimientos, 335
  - α) Sistemas discontinuos o estáticos, 335
  - β) Sistemas de flujo continuo o dinámicos, 335
- 6.1. a\*) Principio del cálculo del rendimiento de la reacción en función de la duración del contacto y en función de la temperatura  $T$ , 335
  - 1.º Variación del rendimiento de la reacción  $x$  en el interior de un reactor cilíndrico de sección  $S$  en función del trayecto  $z$  recorrido por un sistema gaseoso sin difusión longitudinal, 335

- 2.º Variación de  $T$  en función de  $x$  en el reactor, 337
- 6.1. b) Rendimientos y grados de transformación, producción horaria por unidad de volumen, 337
- 1.º Grado de avance de la reacción o de transformación del reactivo A, 337
- 2.º Rendimiento teórico (o rendimiento en A' con respecto a A), 337
- 3.º Rendimiento práctico (o rendimiento de transformación de A), 338
- 4.º Producción horaria por unidad de volumen PHV (o conversión horaria), 338
- 6.2. Síntesis del amoníaco gaseoso, 339**
- 6.2. a) Proporción óptima de los reactivos, 340
- 6.2. b) Estudio estático de la influencia de la temperatura y de la presión, 340
- 6.2. c) Estudio cinético. Elección del catalizador. Diseño de un reactor catalítico, 342
- 1.º Teoría elemental de la cinética de la síntesis. Elección del catalizador, 342
- 2.º\* Principio del cálculo de un reactor catalítico. Gráficos cinéticos, 343
- $\alpha^*$ ) Gráficos  $x = g(\theta)$  para diferentes secciones del reactor, 343
- $\beta$ ) Gráficos de  $x = F(t)$  isoterma;  $x = G(t)$ , de igual duración (isócrono), 345
- $\gamma$ ) Expresión de la longitud Z del reactor (y de la duración de de la permanencia  $\tau$ ) en función de  $x_2$ . Expresión de PHV, 345
- $\delta^*$ ) Transferencia de calor y elección de la longitud del reactor, Z, 346
- 6.3. Síntesis del trióxido de azufre, SO<sub>3</sub> (anhídrido sulfúrico), 348**
- 6.3. a) Estudio estático: influencia de los gases inertes (N<sub>2</sub>), 349
- 6.3. b\*) Determinación de la transferencia óptima de calor. Adiabática de conversión para una etapa catalítica, 350
- 6.3. c) Cinética de las reacciones catalíticas, 351
- 6.3. d) Obtención de SO<sub>2</sub>. Preparación de oleums y ácido sulfúrico, 351
- 6.4. Equilibrio entre el carbono, el monóxido de carbono y el dióxido de carbono, 351**
- 6.5. Reducción del vapor de agua por el carbono, 353**
- 6.6. Reducción del vapor de agua por monóxido de carbono, 353**
- 6.7. Equilibrios entre el hidrógeno, el agua, el hierro y los óxidos de hierro, 354**

**6.8. Equilibrios entre el monóxido de carbono, el dióxido de carbono, el hierro y los óxidos de hierro. Comparación entre el poder reductor del CO y del H<sub>2</sub>, 355**

**CAPÍTULO 7.**

**Cinética química.** Ejercicios de los capítulos 5 y 6, 359  
Resumen de los ejercicios, 360  
A) Enunciados de los ejercicios, 361  
B) Soluciones abreviadas y resultados numéricos, 375

**ÍNDICE ALFABÉTICO, 407**