

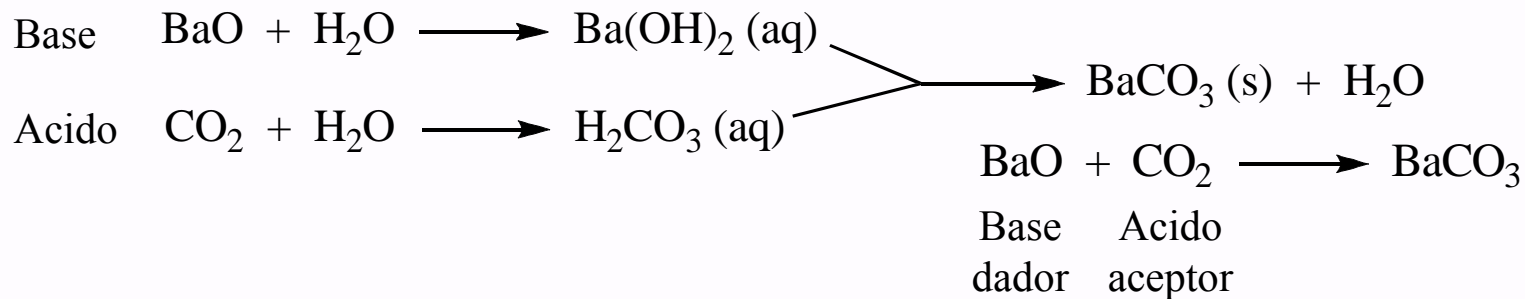
Conceptos Acido-Base (2)



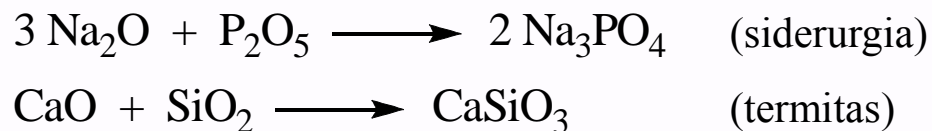
Medida de la fortaleza Acido-Base

Conceptos No Próticos de las Reacciones Acido-Base

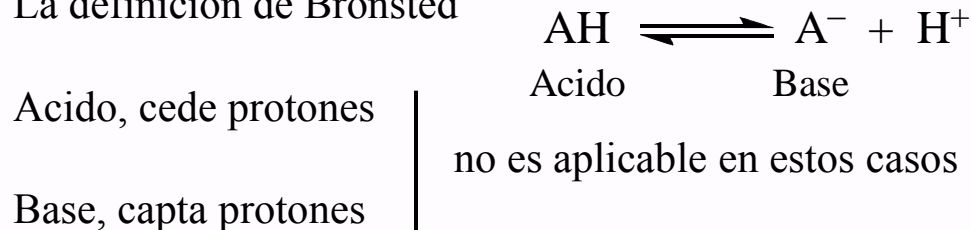
Concepto de Lux



Se conocen otros muchos ejemplos de reacciones directas entre óxidos básicos y óxidos ácidos en ausencia de disolvente, y por lo tanto en ausencia de protones.



La definición de Bronsted

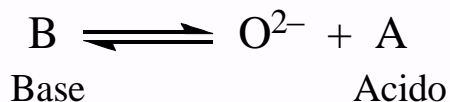


Medida de la fortaleza Acido-Base

Conceptos No Próticos de las Reacciones Acido-Base

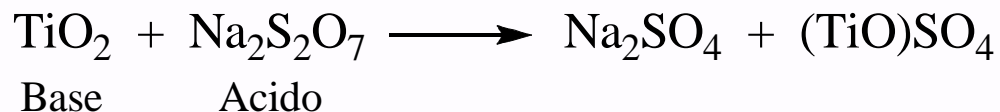
Concepto de Lux

Acido: es un aceptor de grupos óxido

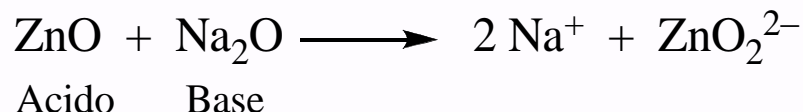
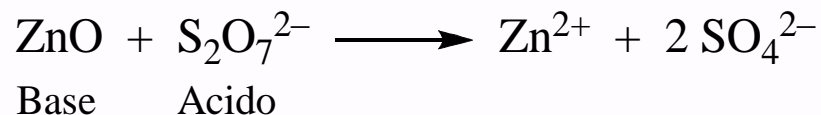


Base: es un dador de grupos óxido

Concepto particularmente aplicable a la química a alta temperatura, tal como la cerámica y la metalurgia. Algunas menas pueden ser disueltas en $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_7$ para extraer el mineral:



Análogamente a otras definiciones ácido-base, podemos tener óxidos anfóteros:

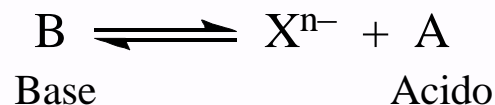


Medida de la fortaleza Acido-Base

Conceptos No Próticos de las Reacciones Acido-Base

Concepto de Lux

Este esquema de transferencia de iones óxido de Lux, puede ser ampliado para cualquier otro proceso que implique la transferencia de un anión

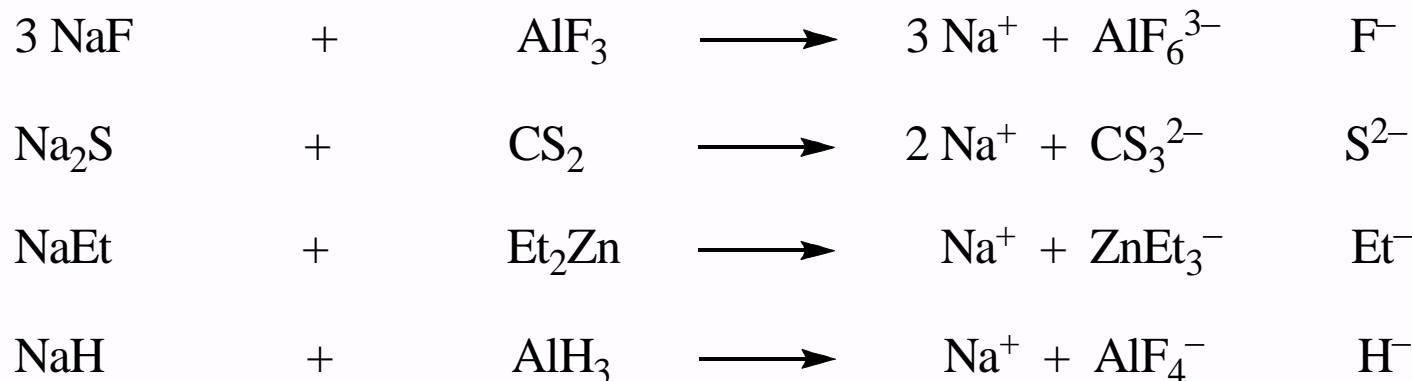


Base:

dador de aniones

Acido:

aceptor de aniones



Medida de la fortaleza Acido-Base

Conceptos No Próticos de las Reacciones Acido-Base

Acidos y Bases de Lewis

En 1938 Lewis propuso la siguiente definición operacional de ácidos y bases, en términos de las reacciones que pueden experimentar:

Neutralización: Los ácidos y bases reaccionan rápidamente para neutralizarse entre sí.

Desplazamiento: Un ácido fuerte desplaza a uno débil de sus compuestos.
Una base fuerte desplaza a una débil de sus compuestos.

Valoración: Puede utilizarse un indicador para determinar el punto final de la neutralización.

Catálisis: Los ácidos (y las bases) pueden catalizar muchas reacciones.

Estas propiedades ya habían sido ampliamente asociados con reacciones ácido-base próticas.

Lewis señaló que compuestos No próticos pueden exhibir propiedades ácido-base, tales como SO_3 (ac), SnCl_4 (ac), AlCl_3 (ac) y BF_3 (ac), entre otros.

Acidos: Disponen de un orbital vacío que puede aceptar un par electrónico para formar un enlace covalente.

Base: Disponen de un par electrónico no compartido, par solitario.

Lewis extiende su concepto ácido-base a compuestos no iónicos, centrando su atención en la fuerza del nuevo enlace covalente formado

Medida de la fortaleza Acido-Base

Conceptos No Próticos de las Reacciones Acido-Base

Acidos y Bases de Lewis – Fuerza de los ácidos y bases de Lewis

Acidos: ... puede aceptar un par electrónico ...

BF ₃	Conforme <i>aumenta la electronegatividad de los sustituyentes</i> ,
BCl ₃	retiran densidad electrónica del átomo central,
BBr ₃	aumenta su avidez por capturar electrones,
BI ₃	<i>aumenta la acidez</i> del ácido de Lewis

Base: ... puede compartir (ceder) un par electrónico ...

:NF ₃	Conforme <i>aumenta la electronegatividad de los sustituyentes</i> ,
:NH ₃	retiran densidad electrónica del átomo central,
	retiene con más fuerza a su par solitario, no lo comparte
	<i>disminuye la basicidad</i> de la base de Lewis

Medida de la fortaleza Acido-Base

Conceptos No Próticos de las Reacciones Acido-Base

Acidos y Bases de Pearson – Duros y blandos

Acidos Duros – AD – Cationes muy pequeños y muy cargados.
Cationes fuertemente polarizantes $r^+ \downarrow, q^+ \uparrow$
 H^+ , Alcalinos, alcalinotérreos, Elementos de transición ligeros
en altos estados de oxidación (Ti^{4+} , Cr^{3+} , Fe^{3+} , Co^{3+})

Acidos Blandos – AB – Cationes grandes o con poca carga.
Cationes poco polarizantes $r^+ \uparrow, q^+ \downarrow$
Elementos de transición más pesados o en bajo estado de
oxidación (Ag^+ , Cu_2^{2+} , Hg_2^{2+} , Hg^{2+} , Pd^{2+} , Pt^{2+})

Bases Duras – BD – Aniones muy pequeños o con poca carga.
Aniones poco polarizables $r^- \downarrow, q^- \downarrow$
 OH^- , haluros, que atraen fuertemente sus electrones

Bases Blandas – BB – Aniones grandes y muy cargados.
Aniones fuertemente polarizables $r^- \uparrow, q^- \uparrow$
Sujetan poco a sus electrones (I^- , S^{2-} , H^-)

El duro con el duro \rightarrow pequeños \rightarrow poco deformables \rightarrow Interacción electrostática
El blando con el blando \rightarrow grandes \rightarrow polarización \rightarrow Interacción covalente

Medida de la fortaleza Acido-Base

Conceptos No Próticos de las Reacciones Acido-Base

Acidos y Bases de Pearson – Clasificación como duros o blandos

Referencia como AD H⁺
AB CH₃Hg⁺



$K_{\text{eq}} \uparrow$, desplazado a la derecha, B prefiere unirse al AB, B es una BB

$K_{\text{eq}} \downarrow$, desplazado a la izquierda, B prefiere unirse al AD, B es una BD

El orden de K_{eq} coincide con el orden de dureza blandura

K_{eq} mayor, base más blanda

K_{eq} menor, base más dura

Conceptos ácido-base, duro-blando, son conceptos “*relativos*”

Medida de la fortaleza Acido-Base

Conceptos No Próticos de las Reacciones Acido-Base

Acidos y Bases de Pearson – Clasificación como duros o blandos

Table 7.5 Classification of hard and soft acids and bases

<i>Hard Acids</i>	<i>Borderline Acids</i>	<i>Soft Acids</i>
H ⁺ , Li ⁺ , Na ⁺ , K ⁺ , Be ²⁺ , Mg ²⁺ , Ca ²⁺ , Sr ²⁺	B(CH ₃) ₃	(BH ₃) ₂
BF ₃ , Al ³⁺ , AlCl ₃ , Al(CH ₃) ₃	Fe ²⁺ , Co ²⁺ , Ni ²⁺ , Cu ²⁺ , Zn ²⁺	GaCl ₃ , GaBr ₃ , GaI ₃
Mn ²⁺ , Cr ³⁺ , Cr ^{VI} , Mn ^{VII} , Mo ^{VI} , W ^{VI}	Ru ²⁺ , Rh ²⁺ , Sn ²⁺ , Sb ³⁺	Cu ⁺ , Co(CN) ₅ ³⁻ , Ag ⁺ , Cd ²⁺
Sc ³⁺ , La ³⁺ , Ce ³⁺ , Lu ³⁺ , Ti ⁴⁺ , Zr ⁴⁺ , Hf ⁴⁺	Rh ³⁺ , Ir ³⁺ , Pb ²⁺ , Bi ³⁺	Pt ²⁺ , Pt ⁴⁺ , Au ⁺ , Hg ₂ ²⁺ , Hg ²⁺ , Tl ⁺
VO ²⁺ , UO ₂ ⁺ , Th ⁴⁺ , Pu ⁴⁺		M ⁰
CO ₂ , SO ₃		
<i>Hard Bases</i>	<i>Borderline Bases</i>	<i>Soft Bases</i>
O ²⁻ , OH ⁻ , F ⁻ , Cl ⁻ , CO ₃ ²⁻ , NO ₃ ⁻ , CH ₃ CO ₂ ⁻	C ₅ H ₅ ⁻ , N ₂ , :NO ₂ ⁻	H ⁻ , R ⁻ , CN ⁻ , I ⁻
PO ₄ ³⁻ , SO ₄ ²⁻ , ClO ₄ ⁻	C ₆ H ₅ NH ₂ , N ₃ ⁻ , :SO ₃ ²⁻ , Br ⁻	C ₂ H ₄ , RNC, CO
H ₂ O, ROH, RO ⁻ , R ₂ O	SCN: ⁻ (N donor)	R ₃ P, (RO) ₃ P, R ₃ As, RSH, R ₂ S
NH ₃ , RNH ₂ , N ₂ H ₄		RS ⁻ , S ₂ O ₃ ²⁻ , :SCN ⁻ (S donor)

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3^a Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 342. **Fig - 126**

Li⁺, Na⁺, K⁺, ... son ácidos duros
Na⁺ es más duro que K⁺, pero más blando que Li⁺

Medida de la fortaleza Acido-Base

Conceptos No Próticos de las Reacciones Acido-Base

Acidos y Bases de Pearson – Clasificación como duros o blandos

Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 347.

Fig - 127

Bases
Hard bases
NH ₃ , RNH ₂ , N ₂ H ₄ H ₂ O, OH ⁻ , O ²⁻ , ROH, RO ⁻ , R ₂ O CH ₃ COO ⁻ , CO ₃ ²⁻ , NO ₃ ⁻ , PO ₄ ³⁻ , SO ₄ ²⁻ , ClO ₄ ⁻ F ⁻ (Cl ⁻)
Borderline bases
C ₆ H ₅ NH ₂ , C ₅ H ₅ N, N ₃ ⁻ , N ₂ NO ₂ ⁻ , SO ₃ ²⁻ Br ⁻
Soft bases
H ⁻ R ⁻ , C ₂ H ₄ , C ₆ H ₆ , CN ⁻ , RNC, CO SCN ⁻ , R ₃ P, (RO) ₃ P, R ₃ As R ₂ S, RSH, RS ⁻ , S ₂ O ₃ ²⁻ I ⁻

Acids
Hard acids
H ⁺ , Li ⁺ , Na ⁺ , K ⁺ (Rb ⁺ , Cs ⁺) Be ²⁺ , Be(CH ₃) ₂ , Mg ²⁺ , Ca ²⁺ , Sr ²⁺ (Ba ²⁺) Sc ³⁺ , La ³⁺ , Ce ⁴⁺ , Gd ³⁺ , Lu ³⁺ , Th ⁴⁺ , U ⁴⁺ , UO ₂ ²⁺ , Pu ⁴⁺ Ti ⁴⁺ , Zr ⁴⁺ , Hf ⁴⁺ , VO ²⁺ , Cr ³⁺ , Cr ⁶⁺ , MoO ₃ ³⁺ , WO ₄ ⁴⁺ , Mn ²⁺ , Mn ⁷⁺ , Fe ³⁺ , Co ³⁺ BF ₃ , BCl ₃ , B(OR) ₃ , Al ³⁺ , Al(CH ₃) ₃ , AlCl ₃ , AlH ₃ , Ga ³⁺ , In ³⁺ CO ₂ , RCO ⁺ , NC ⁺ , Si ⁴⁺ , Sn ⁴⁺ , CH ₃ Sn ³⁺ , (CH ₃) ₂ Sn ²⁺ N ³⁺ , RPO ₂ ⁺ , ROPO ₂ ⁺ , As ³⁺ SO ₃ , RSO ₂ ⁺ , ROSO ₂ ⁺ Cl ³⁺ , Cl ⁷⁺ , I ⁵⁺ , I ⁷⁺ HX (hydrogen bonding molecules)
Borderline acids
Fe ²⁺ , Co ²⁺ , Ni ²⁺ , Cu ²⁺ , Zn ²⁺ Rh ³⁺ , Ir ³⁺ , Ru ³⁺ , Os ²⁺ B(CH ₃) ₃ , GaH ₃ R ₃ C ⁺ , C ₆ H ₅ ⁺ , Sn ²⁺ , Pb ²⁺ NO ⁺ , Sb ³⁺ , Br ³⁺ SO ₂
Soft acids
Co(CN) ₅ ³⁻ , Pd ²⁺ , Pt ²⁺ , Pt ⁴⁺ Cu ⁺ , Ag ⁺ , Au ⁺ , Cd ²⁺ , Hg ₂ ²⁺ , Hg ²⁺ , CH ₃ Hg ⁺ BH ₃ , Ga(CH ₃) ₃ , GaCl ₃ , GaBr ₃ , GaI ₃ , Tl ⁺ , Tl(CH ₃) ₃ CH ₂ , carbenes π-acceptors: trinitrobenzene, chloroanil, quinones, tetracyanoethylene, etc. HO ⁺ , RO ⁺ , RS ⁺ , RSe ⁺ , Te ⁴⁺ , RTe ⁺ Br ₂ , Br ⁺ , I ₂ , I ⁺ , ICN, etc. O, Cl, Br, I, N, RO·, RO ₂ · M ⁰ (metal atoms) and bulk metals

* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 344.

Medida de la fortaleza Acido-Base

Conceptos No Próticos de las Reacciones Acido-Base

Fuerza de los sistemas ácido-base y su relación con la dureza-blandura

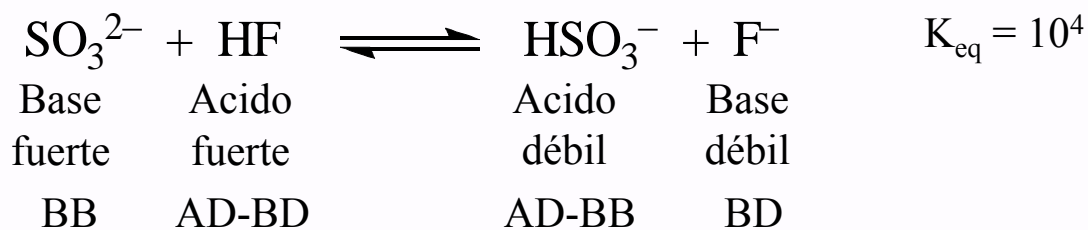
Duro-blando, alude a la especial estabilidad de las interacciones duro-duro y blando-blando, que debe distinguirse claramente de la fuerza inherente del sistema ácido o base.

OH^- y F^- son dos bases duras, OH^- es unas 10^{13} veces más básico que F^- (ref H^+/MeHg^+).

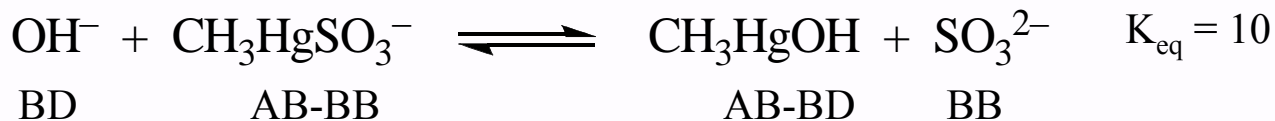
SO_3^{2-} y Et_3P son dos bases blandas, Et_3P es unas 10^7 veces más fuerte que SO_3^{2-} (ref H^+/MeHg^+).

Un ácido o base fuerte puede desplazar a otro más débil, aunque esto “*aparentemente*” viole el principio de dureza-blandura.

SO_3^{2-} (base más fuerte) desplaza al F^- (base más débil), a partir de un ácido duro H^+



OH^- (base muy fuerte) desplaza al SO_3^{2-} (base más débil), a partir de un ácido blando MeHg^+



Medida de la fortaleza Acido-Base

Conceptos No Próticos de las Reacciones Acido-Base

Fuerza de los sistemas ácido-base y su relación con la dureza-blandura

Duro-blando, alude a la especial estabilidad de las interacciones duro-duro y blando-blando, que debe distinguirse claramente de la fuerza inherente del sistema ácido o base.

OH^- y F^- son dos bases duras, OH^- es unas 10^{13} veces más básico que F^- (ref H^+/MeHg^+).

SO_3^{2-} y Et_3P son dos bases blandas, Et_3P es unas 10^7 veces más fuerte que SO_3^{2-} (ref H^+/MeHg^+).

Un ácido o base fuerte puede desplazar a otro más débil, aunque esto “*aparentemente*” viole el principio de dureza-blandura.

En ambos casos, la fuerza de las bases ($\text{SO}_3^{2-} > \text{F}^-$) ($\text{OH}^- > \text{SO}_3^{2-}$) son lo suficientemente grandes como para forzar a estas reacciones hacia la derecha.

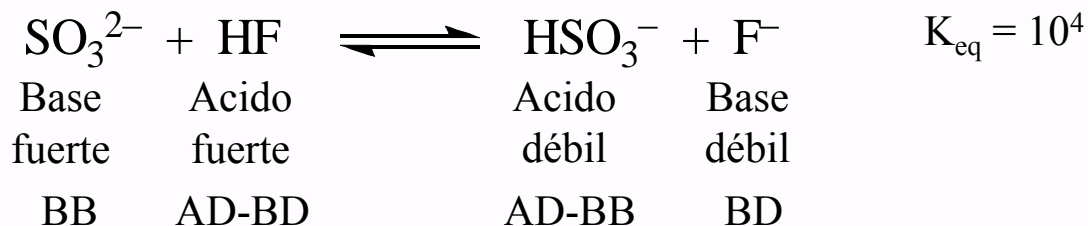
Sólo “*aparentemente*”, puesto que si se encuentra una situación competitiva, se aplica la regla duro-blando.

Medida de la fortaleza Acido-Base

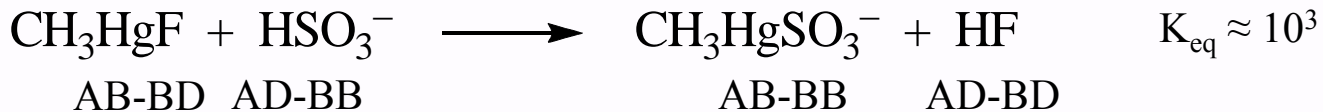
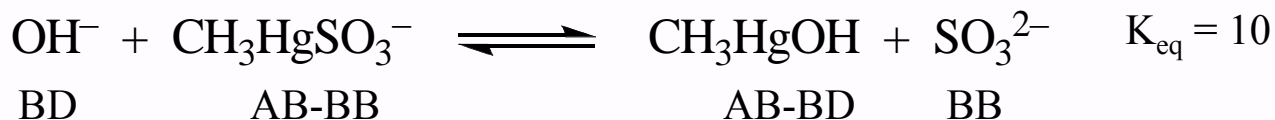
Conceptos No Próticos de las Reacciones Acido-Base

Fuerza de los sistemas ácido-base y su relación con la dureza-blandura

SO₃²⁻ (base más fuerte) desplaza al F⁻ (base más débil), a partir de un ácido duro H⁺



OH⁻ (base muy fuerte) desplaza al SO₃²⁻ (base más débil), a partir de un ácido blando MeHg⁺



Medida de la fortaleza Acido-Base

Conceptos No Próticos de las Reacciones Acido-Base

Simbiosis La dureza o blandura de un sitio ácido o básico no es algo inherente al átomo particular, sino que puede ser influido decisivamente por los sustituyentes que soporta.

La adición de sustituyentes blandos y polarizables, ablanda un sitio que era duro, y
La adición de sustituyentes electrón-atractores (fuertemente electronegativos), endurece el sitio.

* El átomo ácido de boro, B^{3+} , es intermedio entre duro y bando.

Con *sustituyentes duros* como F^- (BD), obtenemos el BF_3 un *ácido* de Lewis *duro*.

Con *sustituyentes blandos* como H^- (BB), obtenemos el BH_3 un *ácido* de Lewis *blando*.

* El ácido duro “*prefiere*” incorporar un 4º ligando duro, y el ácido blando lo “*prefiere*” blando.



* En una reacción de competencia, duro con duro y blando con blando



Los metanos isoelectrónicos fluorizados se comportan de modo similar



Medida de la fortaleza Acido-Base

Conceptos No Próticos de las Reacciones Acido-Base

Acidos y bases de Pearson – Bases teóricas de la dureza y la blandura

De modo relativamente sencillo

Interacciones Acido duro – base dura son básicamente de tipo electrostático, “iónico”.

(Li⁺, Na⁺, K⁺) – (F⁻, OH⁻)

$$U_r = \frac{Z^+ \cdot Z^-}{r^+ + r^-}$$

Cuanto más pequeños sean los iones (más duros)
Mayor será la fuerza de interacción

El duro con el duro

Interacciones Acido blando – base blanda son básicamente de tipo covalente

(Ag⁺, Hg²⁺) – (Cl⁻, I⁻)

Acidos blandos, cationes de transición que NO tienen configuración de Gas Noble, luego son más polarizantes, muy en particular los cationes con configuración “d¹⁰”.

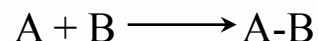
Bases blandas, fuertemente polarizables, unidas a ácidos polarizantes.

Una mayor polarización apoya la existencia de una interacción covalente.

Medida de la fortaleza Acido-Base

Ecuación de Drago-Wayland

En 1965 Drago y Wayland introducen una ecuación empírica de 4 parámetros para describir la energía que acompaña a la reacción entre ácidos y bases débiles y neutros (sin carga) en disolventes poco solvatantes o en fase gaseosa.



$$-\Delta H = E_A \cdot E_B + C_A \cdot C_B$$

E_A, C_A Son los parámetros del ácido, que arbitrariamente toman para el I_2 los valores $E_A = 0,50$ y $C_A = 2$

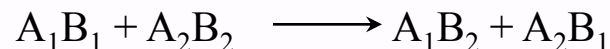
E_B, C_B Son los parámetros de la base

Fig - 128 y 129

E_A, E_B Reflejan la parte electrostática de la interacción ácido-base

C_A, C_B Reflejan la parte covalente de la interacción ácido-base

En el caso de una reacción de intercambio entre dos aductos ácido base



La ecuación adopta la forma

$$\Delta H = \Delta E_A \cdot \Delta E_B + \Delta C_A \cdot \Delta C_B$$

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 343.

* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 336.

Medida de la fortaleza Acido-Base

Ecuación de Drago-Wayland

Estos datos pueden utilizarse para seleccionar disolventes que tengan aproximadamente el mismo grado de interacción ácido-base que los solutos comparando los parámetros E y C.

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 345.

Base	Fig - 129	E_B	C_B	T_B
NH ₃		2.31	2.04	0.56
CH ₃ NH ₂		2.16	3.12	0.59
(CH ₃) ₂ NH		1.80	4.21	0.64
(CH ₃) ₃ N		1.21	5.61	0.75
C ₂ H ₅ NH ₂		2.35	3.30	0.54
HC(C ₂ H ₄) ₃ N		0.80	6.72	0.83
C ₅ H ₅ N		1.78	3.54	0.73
CH ₃ CN		1.64	0.71	0.83
HC(O)N(CH ₃) ₂ (dmf)		2.19	1.31	0.74
(C ₂ H ₅) ₂ O		1.80	1.63	0.76
O(C ₂ H ₄) ₂ O		1.86	1.29	0.71
(CH ₃) ₂ SO (dmsO)		2.40	1.47	0.65
(CH ₃) ₂ O		1.68	1.50	0.73
(CH ₃) ₂ S		0.25	3.75	1.07
(CH ₃) ₃ P		1.46	3.44	0.90

	E	C
Amina 1 ^a MeNH ₂	2,16	3,12
Amina 2 ^a Me ₂ NH	1,80	4,21
Amina 3 ^a Me ₃ N	1,21	5,61
Piridina	1,78	3,54

La Piridina tendría un comportamiento intermedio entre una amina 1^a y una amina 2^a

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 343.

* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 336.

Medida de la fortaleza Acido-Base

Ecuación de Drago-Wayland

Una modificación de la ecuación de Drago-Wayland incluye el término $W = R_A \cdot T_B$, que habitualmente toma valor 0 para ácidos y bases neutros, pero que cobra importancia en el caso de ácidos catiónicos y/o bases aniónicas.

$$-\Delta H = E_A \cdot E_B + C_A \cdot C_B + R_A \cdot T_B$$

- E_A, C_A Son los parámetros del ácido, que arbitrariamente toman para el I_2 los valores $E_A = 0.50$ y $C_A = 2.00$
- E_B, C_B Son los parámetros de la base
- E_A, E_B Reflejan la parte electrostática de la interacción ácido-base
- C_A, C_B Reflejan la parte covalente de la interacción ácido-base
- R_A Término para el ácido como aceptor
- T_B Término para la base como transmisor / donador

Fig - 128 y 129

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 343.

* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 336.

4.1.- Conceptos Acido-Base

Profesor: Rafael Aguado Bernal

Medida de la fortaleza Acido-Base

Ecuación de Drago-Wayland

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 345.

Fig - 129

Table 7.6 E and C parameters [Equation (7.78)] for some acids and bases^{a-c}

Acid	E_A	C_A	R_A	Acid	E_A	C_A	R_A
I ₂	0.50	2.00	—	H ⁺	45.00	13.03	130.21
H ₂ O	1.54	0.13	0.20	Li ⁺	11.72	1.45	24.21
H ₂ S	0.77	1.46	0.56	K ⁺	3.78	0.10	20.79
HF	2.03	0.30	0.47	NH ₄ ⁺	4.31	4.31	18.52
HCl	3.69	0.74	0.55	(CH ₃) ₂ NH ₂ ⁺	3.21	0.70	20.72
HCN	1.77	0.50	0.54	(CH ₃) ₃ NH ⁺	2.60	1.33	15.95
CH ₃ OH	1.25	0.75	0.39	(CH ₃) ₄ N ⁺	1.96	2.36	8.33
C ₂ H ₅ OH	1.34	0.69	0.41	C ₅ H ₅ NH ⁺	1.81	1.33	21.72
C ₆ H ₅ OH	2.27	1.07	0.39	H ₃ O ⁺	13.27	7.89	20.01
(CH ₃) ₃ COH	1.36	0.51	0.48	(H ₂ O) ₂ H ⁺	11.39	6.03	7.36
HCCl ₃	1.49	0.46	0.45	(H ₂ O) ₃ H ⁺	11.21	4.66	2.34
HCF ₃	1.32	0.91	0.27	(H ₂ O) ₄ H ⁺	10.68	4.11	-3.25
CH ₃ CO ₂ H	1.72	0.86	0.63	CH ₃ ⁺	19.70	12.61	55.09
B(OCH ₃) ₃	0.54	1.22	0.84				
B(C ₂ H ₅) ₃	1.70	2.71	0.61				
PF ₃	0.61	0.36	0.87				
AsF ₃	1.48	1.14	0.78				
SO ₂	0.56	1.52	0.86				

Base	E_B	C_B	T_B	Base	E_B	C_B	T_B
NH ₃	2.31	2.04	0.56	CH ₃ OH	1.80	0.65	0.70
CH ₃ NH ₂	2.16	3.12	0.59	C ₂ H ₅ OH	1.85	1.09	0.70
(CH ₃) ₂ NH	1.80	4.21	0.64	C ₆ H ₆	0.70	0.45	0.81
(CH ₃) ₃ N	1.21	5.61	0.75	H ₂ S	0.04	1.56	1.13
C ₂ H ₅ NH ₂	2.35	3.30	0.54	HCN	1.19	0.10	0.90
HC(C ₂ H ₄) ₃ N	0.80	6.72	0.83	H ₂ O	2.28	0.10	0.43
C ₃ H ₅ N	1.78	3.54	0.73				
CH ₃ CN	1.64	0.71	0.83	F ⁻	9.73	4.28	37.40
HC(O)N(CH ₃) ₂				Cl ⁻	7.50	3.76	12.30
(dmf)	2.19	1.31	0.74	Br ⁻	6.74	3.21	5.86
(C ₂ H ₅) ₂ O	1.80	1.63	0.76	I ⁻	5.48	2.97	6.26
O(C ₂ H ₄) ₂ O	1.86	1.29	0.71	CN ⁻	7.23	6.52	9.20
(CH ₃) ₂ SO				OH ⁻	10.43	4.60	50.73
(dmsO)	2.40	1.47	0.65	CH ₃ O ⁻	10.03	4.42	33.77
(CH ₃) ₂ O	1.68	1.50	0.73				
(CH ₃) ₂ S	0.25	3.75	1.07				
(CH ₃) ₃ P	1.46	3.44	0.90				

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 343.

* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 336.

Medida de la fortaleza Acido-Base

Ecuación de Drago-Wayland

Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 337.

Fig - 128

Acid	E_A	C_A	R_A	Acid	E_A	C_A	R_A
I_2	0.50	2.00	—	H^+	45.00	13.03	130.21
H_2O	1.54	0.13	0.20	CH_3^+	19.70	12.61	55.09
SO_2	0.56	1.52	0.85	Li^+	11.72	1.45	24.21
HF^b	2.03	0.30	0.47	K^{+b}	3.78	0.10 ^b	20.79
HCN^b	1.77	0.50	0.54	NO^{+b}	0.1 ^b	6.86	45.99
CH_3OH	1.25	0.75	0.39	NH_4^{+b}	4.31	4.31	18.52
H_2S^b	0.77	1.46	0.56	$(CH_3)_2NH_2^{+b}$	3.21	0.70	20.72
HCl^b	3.69	0.74	0.55	$(CH_3)_4N^{+b}$	1.96	2.36	8.33
C_6H_5OH	2.27	1.07	0.39	$C_5H_5NH^{+b}$	1.81	1.33	21.72
$(CH_3)_3COH$	1.36	0.51	0.48	$(C_2H_5)_3NH^{+b}$	2.43	2.05	11.81
$HCCl_3$	1.49	0.46	0.45	$(CH_3)_3NH^{+b}$	2.60	1.33	15.95
$CH_3CO_2H^b$	1.72	0.86	0.63	H_3O^+	13.27	7.89	20.01
CF_3CH_2OH	2.07	1.06	0.38	$(H_2O)_2H^+$	11.39	6.03	7.36
C_2H_5OH	1.34	0.69	0.41	$(H_2O)_3H^+$	11.21	4.66	2.34
$i-C_3H_7OH$	1.14	0.90	0.46	$(H_2O)_4H^{+b}$	10.68	4.11	3.25
PF_3^b	0.61	0.36	0.87	$(CH_3)_4Sn^+$	7.05	3.15	26.93
$B(OCH_3)_3^b$	0.54	1.22	0.84	$(C_2H_5)_4Ni^+$	11.88	3.49	32.64
AsF_3^b	1.48	1.14	0.78	$(CH_3)_3NH_3^{+b}$	2.18	2.38	20.68
$Fe(CO)_5^b$	0.10	0.27	1.00				
CHF_3^b	1.32	0.91	0.27				
$B(C_2H_5)_3^b$	1.70	2.71	0.61				
Base ^c	E_B	C_B	T_B	Base ^c	E_B	C_B	T_B
NH_3	2.31	2.04	0.56	C_5H_5NO	2.29	2.33	0.67
CH_3NH_2	2.16	3.12	0.59	$(CH_3)_3P$	1.46	3.44	0.90
$(CH_3)_2NH$	1.80	4.21	0.64	$(CH_3)_2O$	1.68	1.50	0.73
$(CH_3)_3N$	1.21	5.61	0.75	$(CH_3)_2S$	0.25	3.75	1.07
$C_2H_5NH_2$	2.35	3.30	0.54	CH_3OH	1.80	0.65	0.70
$(C_2H_5)_3N$	1.32	5.73	0.76	C_2H_5OH	1.85	1.09	0.70
$HC(C_2H_4)_3N$	0.80	6.72	0.83 ^d	C_6H_6	0.70	0.45	0.81
C_5H_5N	1.78	3.54	0.73	H_2S^b	0.04	1.56	1.13
$4-CH_3C_5H_4N$	1.74	3.93	0.73 ^d	HCN^b	1.19	0.10	0.90
$3-CH_3C_5H_4N$	1.76	3.72	0.74 ^d	H_2CO^b	1.56	0.10	0.76
$3-ClC_5H_4N$	1.78	2.81	0.75 ^d	CH_3Cl^b	2.54	0.10	0.23
CH_3CN	1.64	0.71	0.83	CH_3CHO^b	1.76	0.81	0.74
$CH_3C(O)CH_3$	1.74	1.26	0.80	H_2O^b	2.28	0.10	0.43
$CH_3C(O)OCH_3$	1.63	0.95	0.86	$(CH_3)_3COH^b$	1.92	1.22	0.71
$CH_3C(O)OC_2H_5$	1.62	0.98	0.89	$C_6H_5CN^b$	1.75	0.62	0.85
$HC(O)N(CH_3)_2$	2.19	1.31	0.74 ^d	F^-	9.73	4.28	37.40
$(C_2H_5)_2O$	1.80	1.63	0.76	Cl^{-b}	7.50	3.76	12.30
$O(CH_2CH_2)_2O$	1.86	1.29	0.71	Br^{-b}	6.74	3.21	5.86
$(CH_2)_4O$	1.64	2.18	0.75	I^-	5.48	2.97	6.26
$(CH_2)_5O$	1.70	2.02	0.74 ^d	CN^-	7.23	6.52	9.20
$(C_2H_5)_2S$	0.24	3.92	1.10 ^d	OH^{-b}	10.43	4.60	50.73
$(CH_3)_2SO$	2.40	1.47	0.65	CH_3O^{-b}	10.03	4.42	33.77

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 343.

* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 336.

Medida de la fortaleza Acido-Base

Ecuación de Drago-Wayland

Calcular la entalpía de formación del aducto para la combinación del H^+ con H_2O y formas las sucesivas $H(H_2O)_n^+$ ($n = 1, 2, 3, 4$)

$$-\Delta H = E_A \cdot E_B + C_A \cdot C_B + R_A \cdot T_B$$



$$-\Delta H = 45.00 \cdot E_B + 13.03 \cdot C_B + 130.21 \cdot T_B$$

$$-\Delta H = 45.00 \cdot 2.28 + 13.03 \cdot 0.10 + 130.21 \cdot 0.43$$

$$-\Delta H = 159.89 \text{ kCal/mol}$$

Acid	E_A	C_A	R_A
H^+	45.00	13.03	130.21
Li^+	11.72	1.45	24.21
K^+	3.78	0.10	20.79
NH_4^+	4.31	4.31	18.52

Base	E_B	C_B	T_B
CH_3OH	1.80	0.65	0.70
C_2H_5OH	1.85	1.09	0.70
C_6H_6	0.70	0.45	0.81
H_2S	0.04	1.56	1.13
HCN	1.19	0.10	0.90
H_2O	2.28	0.10	0.43

¿?

Acid	E_A	C_A	R_A
I_2	0.50	2.00	—
H_2O	1.54	0.13	0.20
H_2S	0.77	1.46	0.56
HF	2.03	0.30	0.47
HCl	3.69	0.74	0.55

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 343.

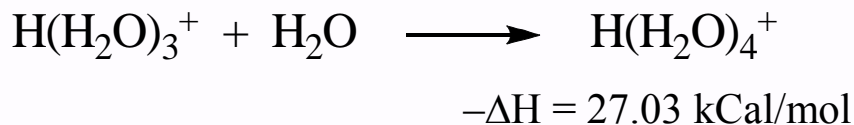
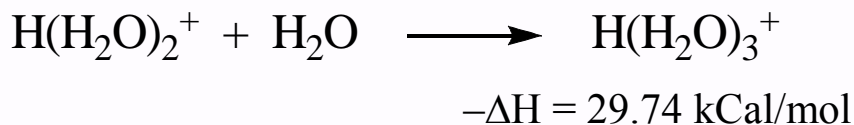
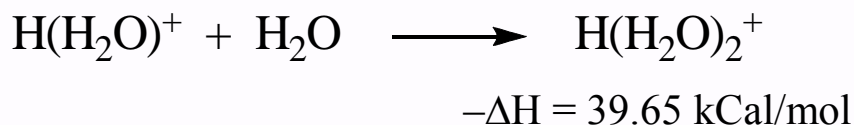
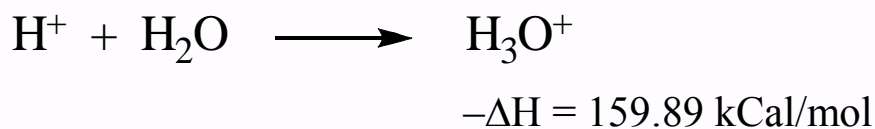
* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 336.

Medida de la fortaleza Acido-Base

Ecuación de Drago-Wayland

Calcular la entalpía de formación del aducto para la combinación del H^+ con H_2O y formas las sucesivas $H(H_2O)_n^+$ ($n = 1, 2, 3, 4$)

$$-\Delta H = E_A \cdot E_B + C_A \cdot C_B + R_A \cdot T_B$$



Acid	E_A	C_A	R_A
H^+	45.00	13.03	130.21
Li^+	11.72	1.45	24.21
K^+	3.78	0.10	20.79
NH_4^+	4.31	4.31	18.52
$(CH_3)_2NH_2^+$	3.21	0.70	20.72
$(CH_3)_3NH^+$	2.60	1.33	15.95
$(CH_3)_4N^+$	1.96	2.36	8.33
$C_5H_5NH^+$	1.81	1.33	21.72
H_3O^+	13.27	7.89	20.01
$(H_2O)_2H^+$	11.39	6.03	7.36
$(H_2O)_3H^+$	11.21	4.66	2.34
$(H_2O)_4H^+$	10.68	4.11	-3.25
CH_4^+	10.70	12.61	55.00

Base	E_B	C_B	T_B
CH_3OH	1.80	0.65	0.70
C_2H_5OH	1.85	1.09	0.70
C_6H_6	0.70	0.45	0.81
H_2S	0.04	1.56	1.13
HCN	1.19	0.10	0.90
H_2O	2.28	0.10	0.43

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 343.

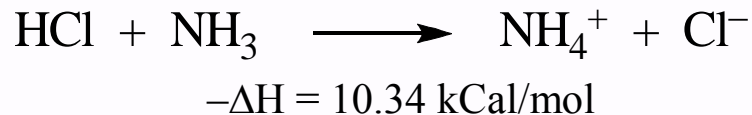
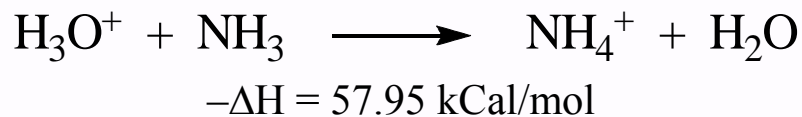
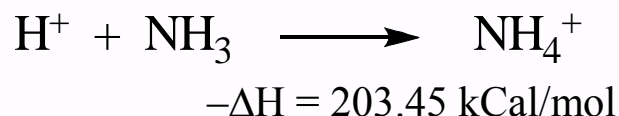
* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 336.

Medida de la fortaleza Acido-Base

Ecuación de Drago-Wayland

Calcular la entalpía de formación del aducto para la combinación del H^+ con H_2O y formas las sucesivas $H(H_2O)_n^+$ ($n = 1, 2, 3, 4$)

$$-\Delta H = E_A \cdot E_B + C_A \cdot C_B + R_A \cdot T_B$$



Para casa

Vosotros hacéis los cálculos para los siguientes sistemas

Y si surge alguna duda ...

Preguntad !!!

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 343.

* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 336.