Fórmula química

http://docsetools.com/articulos-utiles/article_116691.html

Una fórmula química es una forma de expresar la información acerca de las proporciones de átomos que constituyen un compuesto químico en particular, el uso de una sola línea de símbolos químicos de elementos, números, ya veces también otros símbolos, como paréntesis, guiones, paréntesis, y más y menos signos. Estos se limitan a una sola línea tipográfica de símbolos, que puede incluir subíndices y superíndices. Una fórmula química no es un nombre químico, y que no contiene palabras. A pesar de una fórmula química puede implicar ciertas estructuras químicas simples, que no es lo mismo que una fórmula química estructural completo. Las fórmulas químicas son más limitantes que los nombres y fórmulas químicas estructural.

Los tipos más simples de las fórmulas químicas se llaman fórmulas empíricas, que utilizan sólo letras y números que indican relaciones proporcionales atómicas. Fórmulas moleculares indican los números simples de cada tipo de átomo en una molécula de una sustancia molecular, y por tanto son a veces el mismo como fórmulas empíricas, y en otras ocasiones requieren números mayores que hacen fórmulas empíricas. Un ejemplo de la diferencia es la fórmula empírica para la glucosa, que es CH_2O , mientras que su fórmula molecular requiere que todos los números que debe aumentarse en un factor de seis, dando $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$.

A veces, una fórmula química es complicada por que se escribe como una fórmula condensada, que transmite información adicional acerca de las formas particulares en las que los átomos están unidos químicamente entre sí, ya sea en enlaces covalentes, enlaces iónicos, o diversas combinaciones de estos tipos. Esto es posible si la unión relevante es fácil para mostrar en una dimensión. Un ejemplo es la fórmula molecular/química condensada para el etanol, que es $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$ o $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$. Sin embargo, incluso una fórmula química condensada es necesariamente limitado en su capacidad para mostrar las relaciones complejas de unión entre los átomos, especialmente los que tienen átomos de bonos a cuatro o más sustituyentes diferentes.

Desde una fórmula química debe ser expresado como una sola línea de símbolos de los elementos químicos, a menudo no puede ser tan informativa como una verdadera fórmula estructural, que es una representación gráfica de la relación espacial entre los átomos en los compuestos químicos. Por razones de complejidad estructural, no existe una fórmula química condensada que especifica la glucosa. Existen nombres químicos equivalentes lineales que pueden y especificar cualquier fórmula estructural compleja, pero estos nombres deben utilizar muchos términos, en lugar de los símbolos simples elementos, números y símbolos tipográficos simples que definen una fórmula química.

Las fórmulas químicas se pueden usar en las ecuaciones químicas para describir reacciones químicas y otras transformaciones químicas, tales como la disolución de compuestos iónicos en una solución. Si bien, como se ha señalado, las fórmulas químicas no tienen el poder de las fórmulas estructurales para mostrar las relaciones químicas entre los átomos, que son suficientes para hacer un seguimiento de los números de átomos y el número de cargos electical en las reacciones químicas, equilibrando así las ecuaciones químicas para que estas ecuaciones se puede utilizar en

problemas químicas que implican la conservación de los átomos, y la conservación de la carga eléctrica.

Una fórmula química identifica cada elemento constituyente por su símbolo químico e indica el número proporcional de átomos de cada elemento. En las fórmulas empíricas, estas proporciones comienzan con un elemento clave y luego asignan números de átomos de los otros elementos en el compuesto, como proporciones el elemento clave. Para los compuestos moleculares, estos números relación de todo se pueden expresar como números enteros. Por ejemplo, la fórmula empírica de etanol puede ser escrito C_2H_6O debido a que las moléculas de etanol todos contienen dos átomos de carbono, seis, átomos de hidrógeno y un átomo de oxígeno. Algunos tipos de compuestos iónicos, sin embargo, no pueden ser escritos con fórmulas completamente de números enteros empíricos. Un ejemplo es el carburo de boro, cuya fórmula de CB_n es una relación en número no entero variable n que van desde más de 4 a más de 6,5.

Cuando el compuesto químico de la fórmula consta de moléculas simples, fórmulas químicas a menudo emplean formas para sugerir la estructura de la molécula. Este tipo de fórmulas están diversamente conocidos como fórmulas moleculares y fórmulas condensadas. Una fórmula molecular enumera el número de átomos de reflejarlas en la molécula, de modo que la fórmula molecular para la glucosa es $C_6H_{12}O_6$ en lugar de la fórmula empírica glucosa, que es CH_2O . Sin embargo, con excepción de las sustancias muy simples, fórmulas químicas moleculares carecen necesitan información estructural y son ambiguas.

Para las moléculas simples, una fórmula condensada es un tipo de fórmula química que puede implicar totalmente una fórmula estructural correcta. Por ejemplo, el etanol puede estar representado por la fórmula química condensada CH_3CH_2OH , y éter de dimetilo por la fórmula condensada CH_3OCH_3 . Estas dos moléculas tienen las mismas fórmulas empíricas y moleculares, pero pueden ser diferenciadas por las fórmulas que se muestran condensados, que son suficientes para representar la estructura completa de estos compuestos orgánicos simples.

Fórmulas químicas condensados también pueden ser utilizados para representar los compuestos iónicos que no existen como moléculas discretas, pero sin embargo no contienen grupos unidos covalentemente dentro de ellos. Estos iones poliatómicos son grupos de átomos que están unidos entre ellos covalentemente y tener una carga iónica en general, tales como el sulfato de 2 - iones. Cada ión poliatómico en un compuesto se escribe de forma individual con el fin de ilustrar los grupos separados. Por ejemplo, el dicloro hexóxido compuesto tiene una fórmula empírica ClO_3 , y la fórmula molecular Cl_2O_6 , pero en formas líquidas o sólidas, este compuesto es más correctamente se muestra por un iónica fórmula condensada -, que ilustra que este compuesto se compone de iones y - iones. En estos casos, la fórmula condensada sólo tiene que ser lo suficientemente complejo como para mostrar al menos una de cada especie iónica.

Las fórmulas químicas deben diferenciarse de los más complejos químicos nombres sistemáticos que se utilizan en los diferentes sistemas de nomenclatura química. Por ejemplo, un nombre sistemático para la glucosa es 2,3,4,5,6-pentahydroxyhexanal. Este nombre, y las reglas detrás de él, especificar plenamente la fórmula estructural de la glucosa, pero el nombre no es una fórmula química, ya que utiliza muchos términos y palabras adicionales que las fórmulas químicas no permiten. Tales nombres químicos

pueden ser capaces de representar las fórmulas estructurales completos sin gráficos, pero para ello, requieren términos de palabras que no forman parte de las fórmulas químicas.

Fórmulas empíricas simples

En química, la fórmula empírica de una sustancia química es una simple expresión de la cantidad relativa de cada tipo de átomo o la relación de los elementos en el compuesto. Las fórmulas empíricas son el estándar para los compuestos iónicos, tales como CaCl_2 , y para macromoléculas, tales como SiO_2 . Una fórmula empírica no hace ninguna referencia a la isomería, estructura o número absoluto de los átomos. El término empírica se refiere al proceso de análisis elemental, una técnica de la química analítica utilizada para determinar la composición de una sustancia química pura por elemento relativo ciento.

Por ejemplo hexano tiene una fórmula molecular de C_6H_{14} , o estructuralmente $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$, lo que implica que tiene una estructura de cadena de 6 átomos de carbono, y 14 átomos de hidrógeno. Sin embargo, la fórmula empírica para el hexano es C_3H_7 . Del mismo modo la fórmula empírica para el peróxido de hidrógeno, H_2O_2 , es simplemente HO que expresa la proporción de 1:1 de elementos componentes. El formaldehído y el ácido acético tiene la misma fórmula empírica, CH_2O . Esta es la fórmula química real para el formaldehído, pero el ácido acético tiene el doble de número de átomos.

Fórmulas condensadas en química orgánica implica geometría molecular y las fórmulas estructurales

La conectividad de una molécula a menudo tiene una fuerte influencia en sus propiedades físicas y químicas y el comportamiento. Dos moléculas compuestas de los mismos números de los mismos tipos de átomos pueden tener completamente diferentes propiedades físicas y químicas y/o si los átomos están conectados de manera diferente o en diferentes posiciones. En tales casos, una fórmula estructural es útil, como lo ilustra el cual los átomos se unen a que otros. A partir de la conectividad, a menudo es posible deducir la forma aproximada de la molécula.

Una fórmula química condensada representa los tipos y la disposición espacial de los enlaces en una sustancia química simple, a pesar de que no especifica necesariamente isómeros o estructuras complejas. Por ejemplo etano se compone de dos átomos de carbono de una sola unidos el uno al otro, con cada átomo de carbono con tres átomos de hidrógeno unidos a él. Su fórmula química se puede representar como CH_3CH_3 . En etileno existe un doble enlace entre los átomos de carbono, por lo tanto, la fórmula química se puede escribir: CH_2CH_2 , y el hecho de que existe un doble enlace entre los carbonos es implícita porque el carbono tiene una valencia de cuatro. Sin embargo, un método más explícita es escribir $\text{H}_2\text{C} = \text{CH}_2$ o menos comúnmente $\text{H}_2\text{C} \text{CH}_2$ ∴. Las dos líneas indican que un doble enlace une los átomos en cada lado de ellos.

Un triple enlace puede ser expresada con tres líneas o pares de puntos, y si puede haber ambigüedad, una sola línea o un par de puntos se puede utilizar para indicar un enlace sencillo.

Las moléculas con múltiples grupos funcionales que son el mismo pueden ser expresados por que encierra el grupo repetido entre paréntesis. Por ejemplo isobutano puede ser escrito 3CH . Esta fórmula estructural condensada implica una conectividad diferente de otras moléculas que se pueden formar usando los mismos átomos en las mismas proporciones. La fórmula 3CH implica un átomo central de carbono unido a un átomo de hidrógeno y tres grupos CH_3 . El mismo número de átomos de cada elemento puede ser utilizado para hacer una molécula de cadena lineal, butano: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$.

Los nombres químicos en respuesta a las limitaciones de las fórmulas químicas

El alqueno llamado, pero-2-eno tiene dos isómeros que la fórmula química $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}_3$ no identifica. La posición relativa de los dos grupos metilo debe ser indicado por la notación adicional que denota si los grupos metilo están en el mismo lado del doble enlace o en los lados opuestos el uno del otro. Estos símbolos adicionales violan las reglas de fórmulas químicas, y comienzan a entrar en el territorio de los sistemas de nombres más complejos.

Como se señaló anteriormente, con el fin de representar las fórmulas estructurales completos de muchos compuestos orgánicos e inorgánicos complejos, la nomenclatura química puede ser necesaria que va mucho más allá de los recursos disponibles utilizados anteriormente en fórmulas condensadas simples. Ver IUPAC de nomenclatura química orgánica y la nomenclatura de la IUPAC de la química inorgánica 2005 para los ejemplos. Además, los sistemas de nomenclatura lineales tales como International Chemical Identifier permiten una computadora para construir una fórmula estructural, y simplificar el sistema de línea de entrada o SMILES molecular de entrada, permite una entrada más legible ASCII. Sin embargo, todos estos sistemas de nomenclatura van más allá de las normas de las fórmulas químicas, y técnicamente son sistemas de nombres químicos no sistemas fórmula.

Polímeros en fórmulas condensadas

Para los polímeros de fórmulas químicas condensados, los paréntesis se colocan alrededor de la unidad de repetición. Por ejemplo, una molécula de hidrocarburo que se describe como CH_350CH_3 , es una molécula con cincuenta unidades que se repiten. Si es desconocido o variable el número de unidades que se repiten, la letra n se puede utilizar para indicar esta fórmula: CH_3nCH_3 .

Los iones en fórmulas condensadas

Para iones, la carga en un átomo en particular puede ser denotado con un superíndice de la derecha. Por ejemplo Na^+ o Cu^{2+} . La carga total de una molécula cargada o un ion poliatómico también se puede mostrar de esta manera. Por ejemplo: H_3O^+ y SO_4^{2-} .

Para iones más complejos, los soportes se utilizan a menudo para encerrar la fórmula iónica, como en 2^- , que se encuentra en compuestos tales como CS_2 . Los paréntesis se pueden anidar dentro de los paréntesis para indicar una unidad que se repite, como en 3^- .

Aquí 6 indica que el ion contiene seis grupos NH₃, y encierra toda la fórmula del ion con carga 3.

Isótopos

Aunque los isótopos son más relevantes para la química nuclear o química isótopo estable que con la química convencional, diferentes isótopos pueden estar indicados con un superíndice prefijado en una fórmula química. Por ejemplo, el ion fosfato que contiene fósforo radiactivo-32 es ³²PO₄³⁻. También un estudio con las proporciones de isótopos estables podría incluir la ¹⁸O¹⁶O molécula.

Un subíndice de la izquierda se utiliza a veces de forma redundante para indicar el número atómico. Por ejemplo, ⁸O₂ de dioxígeno y ¹⁶O₂ para las más abundantes especies isotópicas de dioxígeno. Esto es útil al escribir las ecuaciones para las reacciones nucleares, con el fin de mostrar el equilibrio de carga de forma más clara.

Átomos atrapados

El símbolo @ indica un átomo o molécula atrapado dentro de una jaula, pero no unido químicamente a ella. Por ejemplo, un buckminsterfullereno con un átomo simplemente se representaría como MC₆₀ independientemente de si M estaba dentro del fullereno sin unión química o fuera, unido a uno de los átomos de carbono. Usando el símbolo @, esto se denota M @ C₆₀ si M estaba dentro de la red de carbono. Un ejemplo no fullereno es ³⁻, un ion en el que uno Como átomo está atrapado en una jaula formada por los otros 32 átomos.

Esta notación se propuso en 1991 con el descubrimiento de las jaulas de fullereno, que puede atrapar átomos tales como La para formar, por ejemplo, La @ C₆₀ o C₈₂ La @. La elección del símbolo ha sido explicado por los autores como siendo concisa, fácilmente impresos y transmitidos electrónicamente, y los aspectos visuales que sugieren la estructura de un fullereno endohedral.

Fórmulas químicas no estequiométricas

Las fórmulas químicas más a menudo usan números enteros para cada elemento. Sin embargo, hay una clase de compuestos, denominados compuestos no estequiométricos, que no puede ser representado por pequeños números enteros. Dicha fórmula puede escribirse utilizando fracciones decimales, como en Fe_{0.95}O, o podría incluir una parte variable representada por una letra, como en Fe_{1-x}O, donde x es normalmente mucho menor que 1.

Formas generales para compuestos orgánicos

Una fórmula química utilizada para una serie de compuestos que difieren unos de otros por una unidad de constante se denomina fórmula general. Esta serie se llama la serie homóloga, mientras que sus miembros son llamados homólogos. Por ejemplo alcoholes pueden ser representados por: C_nHOH

Colina System

El sistema de Hill es un sistema de escritura fórmulas químicas tales que el número de átomos de carbono en una molécula se indica primero, el número de átomos de hidrógeno próximos, y luego el número de todos los otros elementos químicos, posteriormente, en orden alfabético. Cuando la fórmula no contiene carbono, todos los elementos, incluyendo el hidrógeno, están ordenados alfabéticamente. Este sistema determinista permite fácil clasificación y búsqueda de compuestos.