

FIG. 5.3. a) Diagrama de orbitales moleculares de la molécula de oxígeno en el estado fundamental (oxígeno triplete). b) Representación espacial de los orbitales en la molécula de oxígeno (en el plano perpendicular se ha representado el orbital π^* semiocupado)

Los dos electrones energéticamente más altos de la molécula de oxígeno triplete se encuentran situados en dos orbitales π^* antienlazantes con espín paralelo. Retirando estos dos electrones (1.^{er} P. I. = 12,10 eV; 2.^o P. I. = 35,15 eV) aumenta el *orden de enlace* (número de electrones en orbitales moleculares enlazantes menos el número de electrones en orbitales moleculares antienlazantes divididos por dos). Este aumento está en concordancia con un acortamiento de la *longitud de enlace* (la distancia entre los núcleos de dos átomos unidos). La tabla 5.4 lo confirma para O_2^+ y O_2^{2+} .

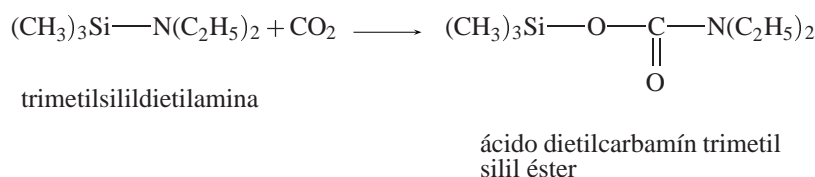
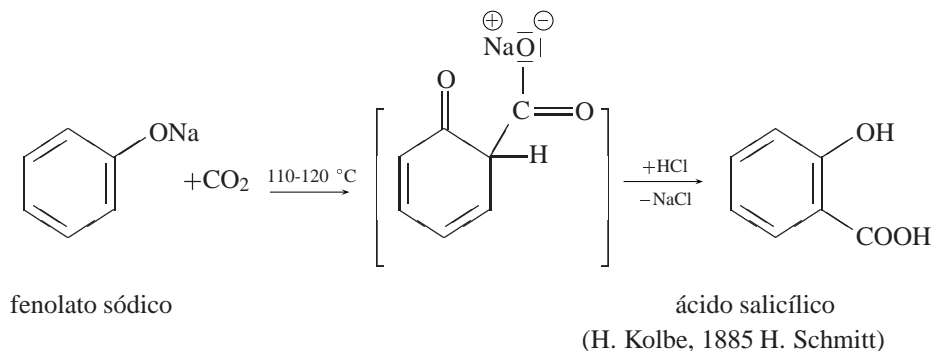
TABLA 5.4. Orden de enlace y longitud de enlace en las especies O_2

	O_2^{2-}	O_2^-	O_2	O_2^+	O_2^{2+}
Orden de enlace	1	1,5	2	2,5	3
Longitud de enlace (pm)	149 ¹	128 ²	120,74	112 ³	—

¹ en H_2O_2 .

² en KO_2 .

³ en $O_2[PtF_6]$.



El CO_2 se puede reducir a carbono con reductores fuertes a altas temperaturas, por ejemplo, con magnesio a temperaturas superiores a $500\text{ }^\circ\text{C}$:



A temperatura ambiente se disuelven 0,88 partes en volumen en 1 parte de agua. Al aumentar la presión aumenta la solubilidad, pero solamente una pequeña cantidad resulta hidratada. La mayor parte del CO_2 disuelto está rodeado de moléculas de agua de forma muy poco consistente y la naturaleza de las especies hidratadas depende del valor del pH. La siguiente transformación:



transcurre muy lentamente, lo que tiene gran importancia desde el punto de vista de los procesos biológicos.

El H_2CO_3 es muy inestable, y solamente en medio no acuoso (éter) y a bajas temperaturas ($-30\text{ }^\circ\text{C}$) se puede aislar un eterato cristalino de color blanco que se descompone fácilmente, de fórmula $\text{H}_2\text{CO}_3 \cdot (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}$.

Considerando lo dicho anteriormente sobre el $\text{CO}_{2\text{hidratado}}$ y el H_2CO_3 en agua, es posible diferenciar entre una primera constante de disociación aparente y otra verdadera del «ácido carbónico».

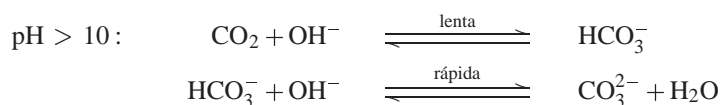
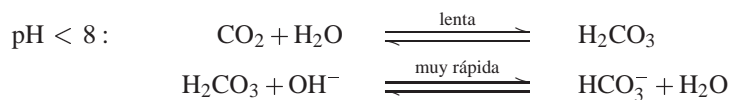
$$1.^{\text{a}} \text{ constante aparente} \quad K_1 = \frac{[\text{H}^+][\text{HCO}_3^-]}{[\text{CO}_{2\text{.aq}}][\text{H}_2\text{CO}_3]} = 4,45 \cdot 10^{-7} \text{ a } 25\text{ }^\circ\text{C}$$

$$1.^{\text{a}} \text{ constante verdadera } K_1 = \frac{[\text{H}^+][\text{HCO}_3^-]}{[\text{H}_2\text{CO}_3]} = 2,5 \cdot 10^{-4} \text{ a } 25^\circ \text{C}$$

$$K_2 = \frac{[\text{H}^+][\text{CO}_3^{2-}]}{[\text{HCO}_3^-]} = 4,84 \cdot 10^{-11} \text{ a } 25^\circ \text{C}$$

Por esta razón, este ácido se puede clasificar como de fuerza media.

En disolución acuosa predominan los siguientes equilibrios:



A valores de pH entre 8 y 10 ninguno de estos mecanismos es predominante.

Carbonatos

Dado que el «ácido carbónico» es un ácido dibásico, da lugar a la formación de hidrógeno-carbonatos (sales que contienen HCO_3^- , bicarbonato) y carbonatos (sales que contienen CO_3^{2-}).

Se pueden obtener carbonatos por introducción de CO_2 en álcalis o por reacción de sales metálicas solubles con carbonatos solubles (carbonatos de metales alcalinos, con la excepción de Li_2CO_3 , y carbonato amónico).

La mayoría de los carbonatos metálicos son muy poco solubles y precipitan fácilmente por medio de reacciones como las indicadas.

Los bicarbonatos (hidrogenocarbonatos) son muy solubles en agua; muchos carbonatos se pueden transformar en bicarbonatos por reacción con CO_2 en exceso, según indica la siguiente reacción:



Esta reacción (que en su equilibrio depende de la temperatura) provoca la disolución de la piedra caliza y la formación de rocas carbonatadas sedimentarias (ap. 7.2.1), la presencia de dureza temporal en las aguas (ap. 5.3.3.1) y la formación de piedras calcáreas en las calderas y recipientes.

Por descomposición térmica de los carbonatos metálicos se obtienen óxidos metálicos y se desprende CO_2 :

