

Tema 4:

La Materia

1. *Clasificación de la materia. Definiciones.*
 2. *Partículas subatómicas que forman la materia. El Origen de la materia. Partículas simples. Quarks. Leptones.*
 3. *Átomos. Estructura electrónica de los átomos.*
 4. *Formación de los elementos. Nucleosíntesis durante el Big Bang. Nucleosíntesis en las estrellas.*
 5. *Clasificación de los elementos químicos: El sistema periódico. Propiedades periódicas.*
 6. *Fuentes naturales de los elementos en la Tierra. Abundancia relativa de los elementos.*
 7. *Moléculas e iones.*
 8. *Tipos de enlaces. Enlace iónico. Enlace covalente. Enlace metálico. Enlace entre moléculas.*
 9. *Procesos químicos. Leyes ponderales. Teoría Atómica de Dalton. Ley de los volúmenes de combinación. Hipótesis de Avogadro. Medida de la cantidad de materia: mol. Medida de la masa en Química. Ecuaciones químicas.*
-

1. CLASIFICACIÓN DE LA MATERIA

Materia es todo lo que constituye el mundo físico que nos rodea, que posee una masa y ocupa un lugar en el espacio. Un esquema de la clasificación de la materia se muestra en la figura 1.

La materia se clasifica en dos formas distintas: **homogénea** y **heterogénea**. Si la materia objeto de estudio es uniforme, es decir, sus propiedades y su composición son las mismas en todos los puntos de su masa, se trata de una **materia**

homogénea. Por el contrario, una **materia** es **heterogénea** cuando presenta fases observables, con distintas propiedades físicas y/o químicas.

1.1. Definiciones

Mezclas: Materia heterogénea que está formada por dos o más sustancias (elementos o compuestos) en proporciones variables. Las mezclas tienen propiedades variables, dependiendo de las proporciones de las sustancias que las componen.

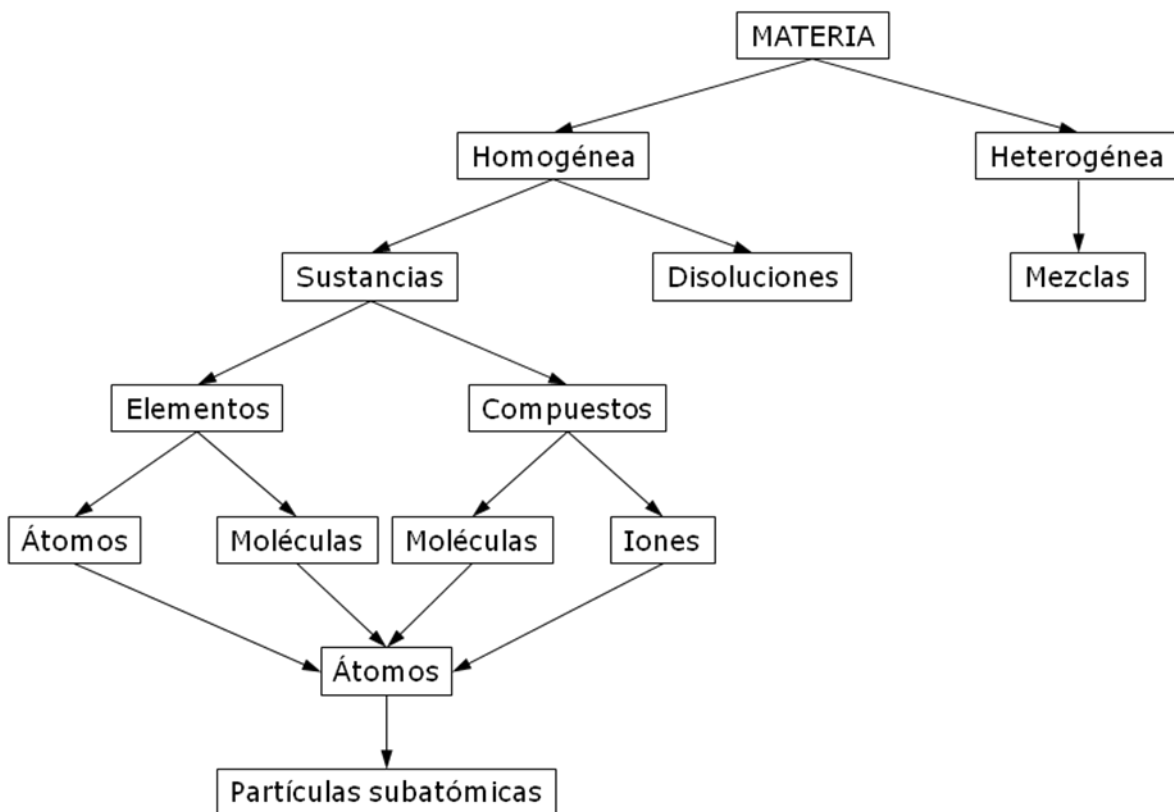


Figura 1. Esquema de la clasificación de la materia.

Disoluciones: Materia homogénea con varios componentes separables por métodos físicos o químicos.

Disoluciones verdaderas: Disoluciones en las que el soluto tiene partículas más pequeñas de 1 nm.

Coloides: Disoluciones en las que el soluto tiene partículas entre 1 nm y 0.2 mm de tamaño.

Suspensiones: Disoluciones en las que el soluto tiene partículas mayores de 0.2 mm.

Sustancias: Materia homogénea con un solo componente.

Elementos: Sustancias formadas por átomos iguales en cuanto a su número atómico. (Pueden ser moléculas diferenciadas, macromoléculas o átomos aislados).

Compuestos: Sustancias formadas por dos o más átomos distintos.

Moléculas: Partículas sin carga eléctrica, formadas por dos o más átomos iguales o distintos.

Iones: Partículas con carga eléctrica. **Simples:** formados por un solo tipo de elemento. **Complejos:** formados por varios tipos de elementos. Pueden ser *aniones* (carga negativa) o *cationes* (carga positiva)

Átomos: Partículas fundamentales de la materia formadas por tres tipos de partículas subatómicas (protones, neutrones y electrones). Los átomos son distintos entre sí a causa del distinto número de partículas subatómicas que los formen. Átomos iguales, en cuanto a número de protones, son las partículas más sencillas que forman un elemento.

2. PARTÍCULAS SUBATÓMICAS QUE FORMAN LA MATERIA. EL ORIGEN DE LA MATERIA

La clasificación de la materia anteriormente presentada no llega más allá de los átomos, dando así a entender que el átomo se considera como la partícula material con entidad propia estable y unas características y propiedades que le hacen ser la *unidad fundamental de la materia* tal como la conocemos en nuestro planeta. Sin embargo, en contradicción con la teoría enunciada por Dalton (1802) los átomos no son indivisibles y están formados a su vez por partículas más pequeñas: **protones**, **electrones** y **neutrones**.

El descubrimiento del electrón, a finales del siglo XIX, del protón en 1906 y del núcleo del átomo en 1911, son tres hechos fundamentales que marcan el punto de partida de la Química moderna. En la actualidad la teoría atómica acepta el hecho de que el átomo está formado por un núcleo donde se encuentran protones y neutrones y un espacio exterior que lo circunda de radio cien mil veces más grande que el del núcleo, donde se encuentran los electrones. En la tabla 1 se muestran las características de estas partículas.

De las tres partículas que componen los átomos (protones, neutrones y electrones), sólo el electrón es ya indivisible y estable. El protón está compuesto de otras más simples (véase siguiente apartado) y es estable. El neutrón está compuesto de otras más simples (véase siguiente apartado) y no es estable, cuando no está

ligado a un átomo se desintegra en un protón, un electrón y un neutrino (partícula cuya vida media es de 11 min.).

Tabla 1. Características del protón, neutrón y electrón.

Nombre	Símbolo	Carga eléctrica relativa	Masa relativa al electrón	Masa en u.m.a.
Protón	p, ${}^1_1\text{H}$, H^+	+1	1836	1,00758
Neutrón	n, ${}^1_0\text{n}$	0	1839	1,00893
Electrón	e, e^- , ${}^0_{-1}\text{e}$	-1	1	0,0001486

2.1. Partículas simples

Mediante estudios en aceleradores de partículas (CERN), en los últimos años se han descubierto más de 30 partículas relativamente estables cuya vida media es mayor de 10^{-10} segundos y más de 50 partículas de vida muy corta (de 10^{-21} a 10^{-23} segundos). No todas ellas existen como tales integradas en los átomos sino que pueden aparecer como productos en procesos o interacciones o participar en ellos mientras se producen. En la actualidad las partículas se consideran de dos tipos: *interaccionales* y *materiales*. Las **partículas interaccionales** se intercambian entre las partículas materiales mientras se produce una interacción entre ellas. Las **partículas materiales** son las que constituyen la materia tal como conocemos el concepto. Pueden ser *quarks* o *leptones*. Las diferencias con las partículas de energía o de interacción son que su spin es $\pm \frac{1}{2}$ y que tienen carga y tienen masa.

2.2. Quarks

En el período comprendido entre los 10^{-43} s y los 10^{-4} s del origen del Universo, la expansión iba acompañada de una rápida disminución de la temperatura, esto supuso la separación de las cuatro interacciones fundamentales y la aparición de una pasta densa de materia y energía donde las partículas elementales quarks y sus antipartículas, antiquarks, colisionaban entre sí y con los fotones en un equilibrio entre materia y radiación.

fotón \leftrightarrow quark + antiquark

Tabla 2. Tipos de partículas fundamentales y sus características. (En negrita las partículas materiales que forman los átomos).

Tipos de partículas	Clases		Spin
Interaccionales	Gravitón		2
	Fotón		1
	Bosón		1
	Gluón		1
Materiales	Quarks	Up +2/3	1/2
		Down -1/3	
		Strange -1/3	
		Charm +2/3	
		Bottom -1/3	
		Top +2/3	
	Leptones	Electrón -1	1/2
		Muón -1	
		Tau -1	
		e.neutrino 0	
		μ.neutrino 0	
		τ.neutrino 0	

La ciencia supone que un fotón muy energético puede materializarse en una partícula y su antipartícula, puesto que se ha observado en el laboratorio que una colisión entre partícula y su antipartícula da lugar a un fotón. Los procesos implicados serían:

El primer proceso (fotón que se materializa en partícula y antipartícula) necesita un aporte de energía, el proceso inverso es espontáneo. Si la temperatura es baja, y por tanto la energía de los fotones es también baja, ya no puede hacerse la materialización del fotón, es decir, la formación de partículas materiales. Este proceso de materialización se produjo sólo en los orígenes del universo cuando la temperatura era altísima.

El segundo proceso, el choque entre partícula y antipartícula formándose fotones, siguió produciéndose ya que, como hemos comentado anteriormente, es espontáneo.

Si no hubiera sucedido otro fenómeno adicional, la probabilidad de que la materia y la antimateria hubieran vuelto a ser fotones sería muy elevada y no existirían en la actualidad. La realidad es que nuestro universo está formado por materia y que no existe la antimateria a no ser en los experimentos provocados. Para explicar esta realidad, existe en Física lo que se llama la **Asimetría de las leyes** comprobada en choques entre partículas en el laboratorio (aceleradores de partículas) que, en este caso, explica la supervivencia de la materia: **por cada mil millones de antiquarks que aparecieran, se crearían mil millones de quarks más uno**. De acuerdo con esta afirmación podrían haberse aniquilado, todas las parejas quark-antiquark pero quedaría un quark entre mil millones. Esta ligera preferencia de la materia sobre la antimateria explica que vivamos en un mundo de materia y que la antimateria no haya sido observada en forma estable y explica también el predominio del gran número de fotones respecto a la materia que existe en la actualidad.

Existen seis tipos de quarks: **up, down, strange, charm, bottom, top**. No son observables aisladamente ya que actúa sobre ellos la interacción nuclear fuerte y forman inevitablemente partículas más complejas. El último citado, el top o verdad fue detectado el año 1994 en los aceleradores de partículas.

Tabla 3. Masa y carga de los distintos tipos de quarks.

Nombre	Masa (GeV/c^2)	Carga
Up (u)	0.005	+2/3
Down (d)	0.01	-1/3
Charm (c)	1.5	+2/3
Strange (s)	0.2	-1/3
Top (t)	180	+2/3
Bottom (b)	4.7	-1/3

2.3. Leptones

El período comprendido entre los 10^{-4} y 10 segundos después de la explosión inicial se llama era **leptón**. De la etapa quark habrían sobrevivido unos pocos quarks, la temperatura era más baja pero todavía suficiente para que los fotones se

materializaran en pares de partícula y antipartícula de menor masa como son los leptones y sus antileptones. Con este tipo de partículas también ocurrió lo mismo que con los quarks, se fueron aniquilando cuando la temperatura bajó lo suficiente y sólo sobrevivieron los leptones "asimétricos". Es decir

$$\text{fotón} \leftrightarrow \text{leptón} + \text{antileptón}$$

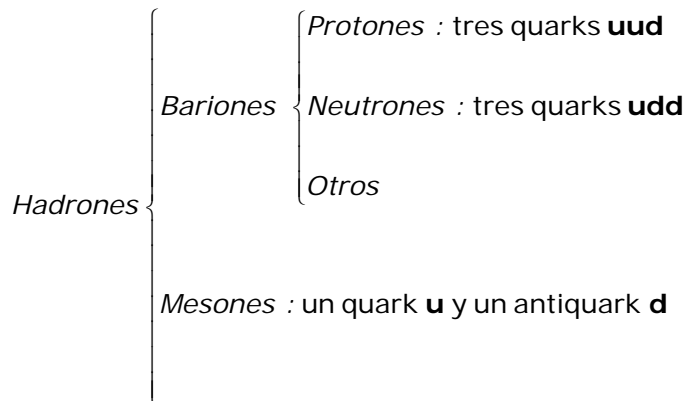
Existen seis tipos de leptones. Tres de ellos tienen masa y carga negativa: el electrón, el muón y la partícula tau; los otros tres, son tres tipos de neutrinos, no tienen carga y se supone que tampoco masa. De todos ellos, son estables el electrón y el neutrino, todos los demás degeneran en ellos.

Tabla 4. Masa y carga de los distintos tipos de leptones.

Nombre	Masa (GeV/c^2)	Carga
e neutrino (ν_e)	$< 7 \times 10^{-9}$	0
electrón (e^-)	0.000511	-1
μ neutrino (ν_μ)	< 0.0003	0
Muón (μ^-)	0.106	-1
τ neutrino (ν_τ)	< 0.03	0
Tau (τ^-)	1.7771	-1

Los neutrinos están asociados a los leptones con carga y en el equilibrio original de este período participaban de las interconversiones de leptones, por ejemplo: un muón puede producir un electrón y dos neutrinos. Esta característica de los neutrinos pudo hacer que en la desaparición de pares de partícula para formar fotones ellos se quedaran en desequilibrio y sobrevivieran. Existe gran cantidad de ellos en el Universo pero son difíciles de detectar pues por no tener carga ni masa, atraviesan los cuerpos sin hacer efecto.

Al final de este período (10 s después del inicio) la temperatura había bajado lo suficiente (10^9 K) como para que asociaciones de partículas, unidas por la interacción nuclear fuerte, fueran estables dando lugar a unas partículas conocidas como hadrones. Una clasificación de los hadrones sería:



Excepto el protón, estas partículas son inestables y acaban degenerando en la de masa menor, que es el protón. El protón es estable y el siguiente en estabilidad es el neutrón (de masa ligeramente superior) que tiene una vida media de unos once minutos cuando está aislado. *Esta estabilidad del protón hace que sea la partícula material, no simple, más abundante en el Universo.*

3. ÁTOMOS

El nombre de átomo proviene de los filósofos griegos que imaginaron que la materia estaba constituida por partículas pequeñas, indivisibles, a las que llamaron átomos. En el siglo XIX, *Dalton* expuso la idea de la naturaleza atómica de la materia para explicar, de forma útil, las leyes de la combinación química, las primeras leyes que se enunciaron sobre los cambios sustanciales de la materia y que cambiaron a la alquimia en ciencia, la Química. Estas leyes se estudiarán más adelante en este tema.

3.1. Estructura del átomo

Thomson en 1904 construyó un modelo muy simple. El átomo estaría constituido por una esfera material de electricidad positiva, en cuyo interior estarían embebidos unos gránulos de carga negativa: los electrones (como pasas en un puding). Pero este modelo era muy rudimentario, por lo que fue sustituido por uno nuevo, basado en nuevos hechos experimentales.

Rutherford en 1911 dio un paso decisivo en el estudio de la estructura del átomo al descubrir que el átomo poseía un núcleo central. La totalidad de la carga se hallaba concentrada en el núcleo y los electrones giraban alrededor, para no caer sobre él por atracción eléctrica. *Rutherford* llegó a esta conclusión mientras investigaba la difusión de partículas alfa por la materia. Para ello realizó, junto con sus colaboradores, una serie de experiencias en las que se hacía incidir un haz de partículas alfa de alta energía, procedentes de una sustancia radiactiva como el radio, sobre láminas metálicas delgadas de oro, plomo, cobre, etc. Observó grandes

desviaciones de algunas partículas alfa. Además, llegó a la conclusión de que el átomo estaría "hueco", concentrándose por tanto esa electricidad positiva en un espacio muy pequeño. Esa parte del átomo con electricidad positiva sería muy pesada. A este espacio reducido de carga positiva y gran masa Rutherford lo denominó **núcleo atómico**, el cual contendría los protones. Rutherford propuso que el número de electrones fuera el mismo que el de protones para que el conjunto fuese neutro, y estarían girando alrededor del núcleo como un pequeño sistema planetario. Es por eso por lo que el sistema resultaba casi "hueco" (Rutherford calculó el diámetro del núcleo, que era del orden de 10^{-8} cm). Esos electrones no se precipitaban sobre el núcleo positivo debido a que la fuerza de atracción estaría compensada por la fuerza centrífuga.

Por otra parte, como la masa encontrada para los átomos era casi siempre superior a la esperada según el número de protones, Rutherford intuyó la presencia también en el núcleo de otras partículas de masa muy parecida a la del protón, pero sin carga eléctrica (estas partículas serían los neutrones).

En la actualidad sabemos que los átomos son partículas complejas formadas por un tipo de leptón (el electrón) y dos tipos de bariones (protones y neutrones) que a su vez están formados por distintos tipos de quarks. Así el núcleo atómico está compuesto por neutrones y protones. Se define el número atómico (Z) como el número de protones presentes en el núcleo, y en un átomo neutro coincide con el número de electrones. También se define N como el número de neutrones, y por tanto podemos definir el número másico (A) como la suma de neutrones y protones, es decir $A = Z + N$.

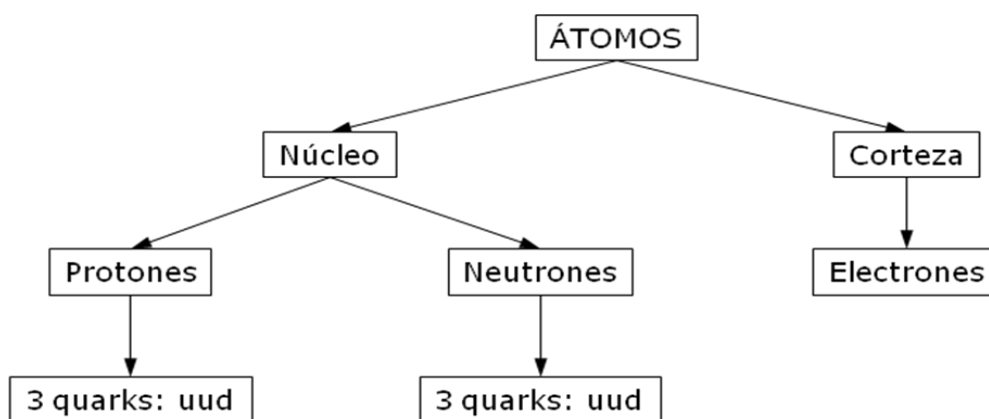


Figura 2. Esquema de la estructura del átomo.

Los protones y neutrones son los principales responsables de la masa atómica, ya que la del electrón es muchísimo menor. Un elemento químico es materia que está formada por átomos iguales en cuanto a su número atómico, es decir, un elemento se caracteriza por su número de protones. Si existen átomos con igual número de protones pero distinto número de neutrones pertenecen todos al mismo elemento y se

llaman isótopos (están en el mismo lugar de la clasificación y tienen Z igual). Los isótopos de un elemento difieren únicamente en su masa porque el número de neutrones es distinto. Un átomo de un elemento se representa como ${}^A_Z X$, y si tiene isótopos su representación sólo variará en el número másico (A).

3.2. Estructura electrónica de los átomos

El modelo atómico de Rutherford no explica todas las propiedades y características de los elementos, fue necesario explicar cómo estaban los electrones distribuidos en la corteza del átomo y sus movimientos, es decir la estructura electrónica de los átomos.

Los primeros intentos de explicar cómo se comportan los electrones en la corteza del átomo utilizaron la Física clásica que describe las fuerzas y los movimientos de partículas con carga eléctrica (interacción electromagnética) pero no se consiguieron resultados que estuvieran de acuerdo con las experiencias.

Las dificultades que existían en la física atómica para explicar la realidad no se solucionaban de forma lógica, hasta que en 1925, dos jóvenes físicos, **Heisenberg** y **Schrödinger**, de forma independiente, resolvieron el problema de la constitución atómica creando una nueva doctrina, que se conoce en la actualidad con el nombre de **Mecánica Cuántica**, sus principios son aplicables tanto a los átomos y partículas subatómicas como al mundo macroscópico.

Los principios básicos de los que parte son: *Dualidad onda-corpúsculo* y *Principio de indeterminación o incertidumbre de Heisenberg*, que suponen una filosofía distinta del principio causa-efecto que domina la mecánica de Newton (que es válida sólo en el mundo macroscópico).

3.3. Mecánica Cuántica Ondulatoria. Ecuación de Schrödinger

Schrödinger desarrolla su teoría, mecánica ondulatoria, basándose en los principios anteriores. Para ello, modifica la ecuación general de los movimientos ondulatorios para que reflejara también las propiedades corpusculares.

La esencia de la teoría de Schrödinger es que pueden encontrarse las energías de los sistemas físicos resolviendo una ecuación que se parece a las ecuaciones de la teoría clásica ondulatoria. La ecuación de ondas para el movimiento de una partícula (electrón) en tres dimensiones es

$$\nabla^2\Psi + \frac{8\pi^2m}{h^2}((E - V))\Psi = 0 \quad (1)$$

Los términos conocidos son m (masa) y V (energía potencial); las incógnitas son E (energía cuantizada) y Ψ (función de onda). La resolución de la ecuación, aunque muy difícil y laboriosa, no es más que un problema matemático, perfectamente realizable.

En el desarrollo matemático se encontró que las soluciones de la ecuación están caracterizadas por tres parámetros o números cuánticos, n , l y m . Además, se admitió que no todas las soluciones eran físicamente aceptables, sino que había unas limitaciones matemáticas: Sólo existían soluciones aceptables para valores determinados de estos números cuánticos. A cada una de estas soluciones aceptables le corresponde un valor único y determinado de la energía, que queda así restringida o cuantizada por las mismas limitaciones matemáticas que Ψ .

Cada solución concreta y aceptable para unos valores concretos de n , l y m , da la expresión de una función de onda determinada, Ψ , que describe el estado de un solo electrón.

3.4. Significado de orbital

Estas funciones de onda, $\Psi_{(x,y,z)}$, en sí mismas no tienen significado físico, son datos matemáticos. Sin embargo, su cuadrado, $\Psi_{(x,y,z)}^2$, sí. Esta expresión da directamente la probabilidad de encontrar al electrón en un punto de coordenadas x,y,z . De la misma manera, $\Psi^2 dV$ será la probabilidad de encontrar al electrón en un volumen dV , o lo que es lo mismo, la densidad electrónica en ese volumen. La zona donde la probabilidad de localizar al electrón es máxima se llama **orbital**.

Cada orbital está definido por los valores de tres números llamados números cuánticos: n , l , m y en cada orbital puede haber dos electrones con otro número cuántico, s , distinto ($1/2$ ó $-1/2$). Los valores de estos números cuánticos están limitados, no pueden ser cualquier número. Se definen como:

n (número cuántico principal): Puede tomar cualquier valor natural excepto el cero. Determina la energía y el tamaño del orbital. Para cada valor de n existen varios valores posibles de los otros números cuánticos.

l (número cuántico acimutal o secundario): Determina la geometría del orbital atómico. Los valores posibles son: $0, 1, 2, \dots, (n-1)$.

m (número cuántico magnético): Es el responsable de la orientación espacial del orbital, es decir, determina las direcciones de máxima densidad electrónica. Los valores posibles son: $+l, \dots, 0, \dots, -l$.

s (número cuántico de espín): Cuantiza el impulso angular de giro del electrón sobre sí mismo y toma los valores $+1/2$ y $-1/2$ (para cada valor de m), y corresponden a los dos sentidos de giro del electrón.

Tabla 5. Números cuánticos y sus posibles valores.

Nombre	Símbolo	Significado	Rango de valores	Valor (ejemplo)
Número cuántico principal	n	Shell o capa	$1 \leq n$	$n = 1, 2, 3 \dots$
Número cuántico acimutal o secundario	l	Subshell o subcapa	$0 \leq l \leq n-1$	Para $n = 3$ $l = 0, 1, 2$ (s, p, d)
Número cuántico magnético	m	Energía shift	$-l \leq m \leq l$	Para $l = 2$ $m = -2, -1, 0, 1, 2$
Número cuántico de spin	s	Spin	$-1/2, 1/2$	Para 1 electrón: $-1/2$ o $1/2$

Cuando en un mismo orbital (iguales valores de n , l y m) hay dos electrones con espines distintos, se dice que están **apareados**, o que tienen espines opuestos o antiparalelos. Si 2 electrones tienen el mismo número de espín, se dice que están **desapareados** o poseen espines paralelos.

3.5. Significado físico de los orbitales

Orbitales s: Los valores de los números cuánticos para los orbitales **s** son los que se muestran en la tabla 6.

Tabla 6. Valores para los números cuánticos n , l y m para los orbitales **s**.

Orbital	n	l	m
s	1, 2, 3,...	0	0

Resolviendo la ecuación de Schrödinger se obtiene una función Ψ , distinta según n , pero que sólo es función de r (radio de la capa esférica), y superficie de probabilidad esférica. Se calculó para el átomo de hidrógeno, resultando ser $r_0 = 0,529 \text{ \AA}$, siendo r_0 la probabilidad máxima de encontrar al electrón, pero el electrón puede estar también a una distancia mayor o menor.

En general, resulta que la "forma" de los orbitales **s** es esférica, y aumenta de tamaño con el valor de n .

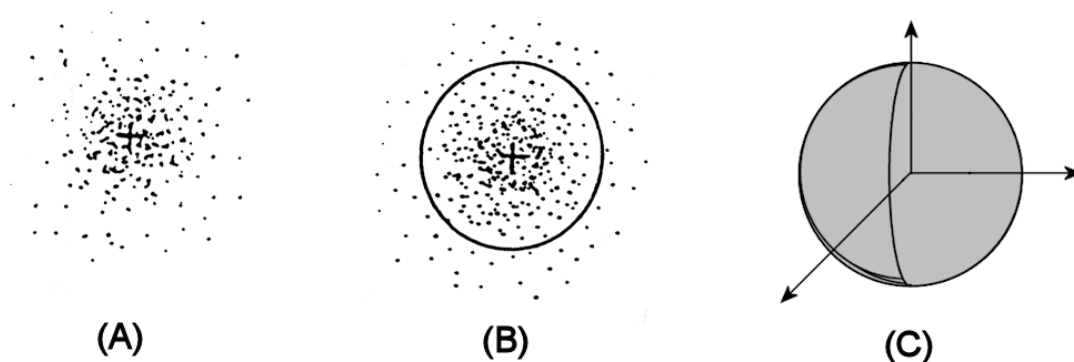


Figura 3. A) Nube de carga. B) Superficie límite de probabilidad. C) Orbital s.

Orbitales p: Los valores de los números cuánticos para los orbitales **p** son los que se muestran en la tabla 7.

Tabla 7. Valores para los números cuánticos n , l y m para los orbitales **p**.

Orbital	n	l	m
p	2, 3, 4,...	1	-1, 0, +1

Al resolver matemáticamente la ecuación de Schrödinger, se obtienen tres funciones de onda diferentes. Son los tres orbitales p: p_x , p_y , p_z .

Para $n=2$, las funciones de onda resultantes son Ψ_{2p_x} , Ψ_{2p_y} , Ψ_{2p_z} . En general, estas funciones son más complicadas que las de los orbitales s, y son funciones no sólo de la distancia al núcleo, r , sino de dos ángulos relacionados con la posición del electrón respecto a los ejes coordenados. Al representar las superficies de probabilidad respectivas, se tienen unas figuras geométricas que ya no son esféricas, sino de lóbulos simétricos, dirigidos a lo largo de cada eje coordenado (estando situado el núcleo en el origen de coordenadas). La "forma" para los tres es igual, pero no la orientación en el espacio. En cada caso existe un plano en el que el valor de ψ es cero y, por lo tanto, la probabilidad de encontrar en él al electrón es nula, es lo que se llama **plano nodal**. Así para el orbital p_x es el plano YZ; para el orbital p_y , el XZ; y para el orbital p_z , el plano XY. En la figura 4 se muestra la forma de los orbitales **p**.

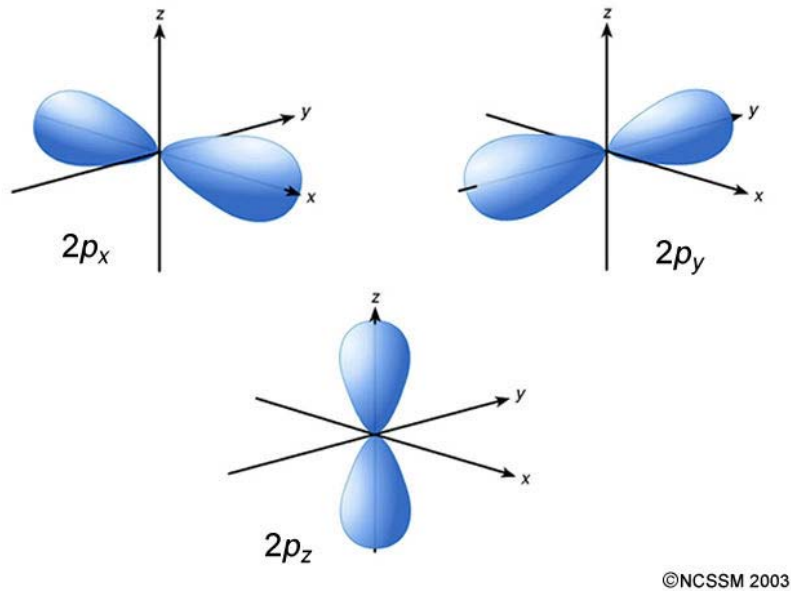


Figura 4. Orbitales p.

Orbitales d: Los valores de los números cuánticos para los orbitales **d** se muestran en la tabla 8.

Tabla 8. Valores para los números cuánticos n , l y m para los orbitales **d**.

Orbital	n	l	m
d	3, 4, 5,...	2	-2, -1, 0, +1, +2

Al resolver la ecuación de ondas para los valores $n = 3$, $l = 2$, $m = +2, \dots, -2$, resultan cinco soluciones diferentes, correspondientes a los cinco orbitales tipo d, que suelen representarse como d_{xy} , d_{yz} , d_{xz} , $d_{x^2-y^2}$, d_{z^2} , cuyas superficies de probabilidad se pueden observar en la figura 5.

Para los cuatro primeros la forma es análoga: Dos pares de lóbulos situados en el mismo plano, perpendiculares entre sí, pero siendo diferente su orientación en el espacio. La superficie de probabilidad del orbital d_{z^2} consta sólo de un par de lóbulos alineados a lo largo del eje Z, y de un anillo situado en el plano XY.

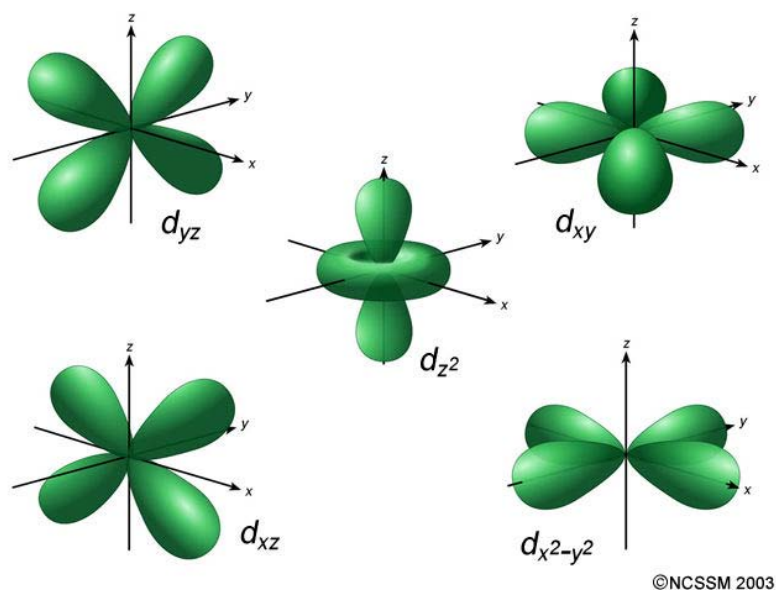


Figura 5. Orbitales d.

3.6. Niveles de energía

Cada solución aceptable de la ecuación de ondas de un orbital, Ψ_i , lleva asociado un valor determinado de la energía, E_i . Partiendo de la ecuación de Schrödinger se llega a la fórmula para los niveles energéticos del electrón en el átomo de hidrógeno, que es

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^2 n^2} \quad (2)$$

Cumple la condición de que la energía depende, en el átomo de hidrógeno, sólo del número n , y para cada valor de n resulta un único valor de la energía. Los electrones que están en capas más externas tienen mayor energía. Si n es infinito, la energía es cero, es el límite (matemático) del átomo, si un electrón adquiere más energía que 0, sale del átomo.

Por tanto, al resolver la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno, se llega a la conclusión de que el sistema sólo puede existir en unos estados estables determinados, cada uno de los cuales viene definido por una función de onda u orbital determinado y tiene una energía también determinada. El éxito de este modelo fue que al calcular con él los valores de la energía, éstos coincidieron con los obtenidos experimentalmente por métodos espectroscópicos.

Al intentar la solución de la ecuación de Schrödinger para átomos polielectrónicos, surgen grandes dificultades en su desarrollo matemático. Hay que

considerar que ahora un determinado electrón no está sujeto solamente a la acción del núcleo, sino también a la de los demás electrones del átomo. Todas estas nuevas variables tienen que traducirse al lenguaje matemático para introducirlas en la ecuación de ondas, y se dificulta mucho la obtención de una solución exacta. Hay que acudir a métodos aproximados, para los que los ordenadores han resultado una ayuda muy eficaz.

Una aproximación consiste en considerar que el electrón que se estudia en este átomo polielectrónico está situado en el campo eléctrico creado por el núcleo y el efecto de los demás electrones. Resulta así que cada electrón del átomo viene definido por una determinada función de onda. La Ψ_{total} del átomo sería el producto de las Ψ respectivas de cada electrón. Al resolverlo matemáticamente salen de nuevo los números n , l , m y s .

Al realizar un estudio matemático mediante curvas de distribución de probabilidad (igual que se hizo con el hidrógeno) resultó que:

1. Los electrones están situados en capas más o menos concéntricas alrededor del núcleo.

2. Los electrones más internos están más próximos al núcleo, formando a su alrededor una especie de pantalla. Los electrones externos están mucho más separados. Al estar los electrones internos tan próximos al núcleo resulta como si la nube de carga estuviera sólo determinada por los electrones externos (electrones de valencia).

En el átomo de hidrógeno, como ya se dijo, los orbitales con un mismo n (ns , np , nd , nf , ...) tienen igual energía, aunque su aproximación al núcleo no sea la misma. Sin embargo, en los átomos polielectrónicos la energía ya no será igual. El **apantallamiento** (o efecto pantalla) de los electrones internos disminuye la acción del núcleo sobre los electrones más externos. El electrón situado en un orbital s , que se encuentra más próximo al núcleo, sufrirá menos el efecto de este apantallamiento, y se necesitará más energía para separarlo que si estuviera situado en un orbital p ; en un orbital p se requerirá también más energía que en un orbital d ; etc. No obstante, los orbitales p de un mismo número n tienen igual energía, así como los d ó los f . Estos orbitales que corresponden al mismo contenido energético se llaman **orbitales degenerados**. La energía en los átomos polielectrónicos depende de n y l .

Será necesario ahora saber cómo se van disponiendo los electrones en los átomos siguiendo el orden creciente de sus números atómicos. Es decir, conocer la **configuración electrónica** de un determinado átomo dado su número atómico. Para ello consideraremos que los orbitales de los átomos polielectrónicos son análogos a los del hidrógeno, aunque no sean idénticos.

Para construir la configuración electrónica de los átomos en su estado normal o fundamental (el de menor energía), se aplica el **Proceso de construcción o de Aufbau** (en alemán, construcción), que se basa en las siguientes normas:

1. Principio de energía mínima: En el átomo en estado normal los electrones se colocan en los orbitales disponibles de menor energía. Estos niveles energéticos se conocen a partir de los datos experimentales suministrados por los espectros atómicos, siguiendo el siguiente orden según su contenido creciente en energía:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p$$

Para un mismo valor de n el orden energético de los orbitales es $s < p < d$ (excepto en el hidrógeno, en que tienen la misma energía). Para poder recordarlo se recurre al diagrama de Möeller, que se muestra en la figura 6.

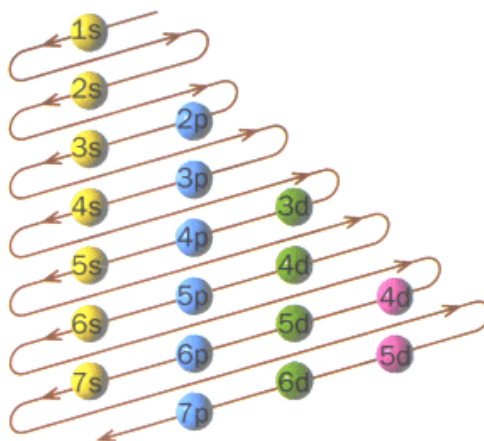


Figura 6. Diagrama de Möeller sobre las configuraciones electrónicas. Fuente: www.gobiernodecanarias.org.

2. Principio de exclusión de Pauli: En un mismo átomo nunca puede haber dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales.

Ejemplo $1s^2$:

Primer electrón: $n = 1 \quad l = 0 \quad m = 0 \quad s = +1/2$

Segundo electrón: $n = 1 \quad l = 0 \quad m = 0 \quad s = -1/2$

3. Regla de Hund (o principio de máxima multiplicidad): Cuando una serie de orbitales degenerados (p , d ó f) se están completando, los electrones se distribuyen manteniéndose con espines paralelos, mientras esto sea posible. Por ejemplo, si se

colocan dos electrones en los orbitales 2p, en principio habría 3 posibilidades, que se muestran en la figura 7.

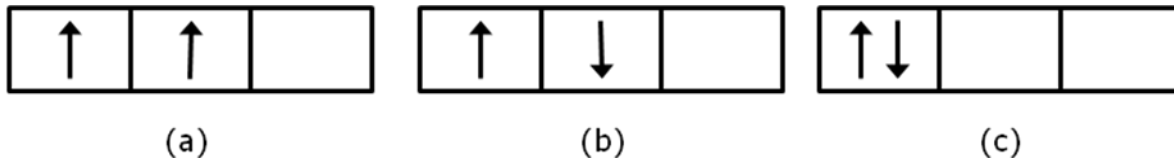
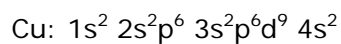
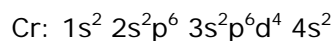


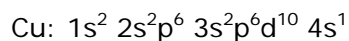
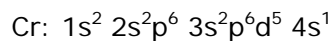
Figura 7. Posibilidades para colocar dos electrones dentro de los orbitales p.

Pero en el estado fundamental la disposición es la representada en la figura 7a según esta regla, pues es la más estable (en las otras dos los espines no son paralelos). Esta es una regla empírica, nacida de la aportación de los datos experimentales.

No obstante, al proceder según el principio de Aufbau, pueden presentarse algunas anomalías en las configuraciones electrónicas de algunos elementos. Así, por ejemplo, las del cromo y cobre deberían ser:



sin embargo, son:



Esto se debe a que la regla de Hund predice una estabilidad adicional a los orbitales semillenos o totalmente llenos. Anomalías parecidas a las configuraciones d^5 y d^{10} , se presentan también con los orbitales f, ya que las configuraciones con f^7 y f^{14} son particularmente estables.

Teniendo en cuenta todas las normas indicadas, se podrá construir la configuración electrónica de cualquier elemento en su estado normal. Cuando al átomo se le comunica una energía, algunos electrones podrán saltar a orbitales superiores o contradirán la regla de Hund, con lo cual pasará a un estado excitado.

La estructura electrónica de un átomo en su estado fundamental y sus posibles estados excitados es la responsable de los llamados cambios químicos (no nucleares), formación y ruptura de enlaces entre átomos, formación de cristales o de moléculas, cambios de estado de agregación o propiedades de los materiales que veremos en temas posteriores. En este tema veremos, a continuación la razón de una característica de la materia, el color.

3.7. El color de los elementos

Uno de los fenómenos cotidianos relacionado con la distribución electrónica y los saltos de los electrones entre niveles es el **color de la materia**. El color de los materiales coloreados es debido, en primer lugar, a la absorción selectiva de luz de determinadas longitudes de onda presentes en la luz incidente con la que se los ilumina. Cada material absorbe los fotones que tienen unas determinadas energías y los otros son transmitidos o reflejados. Así, la absorción de energías en el rango del rojo de una luz blanca incidente, corresponderá a la transmisión de una luz azul a la que se denominará color complementario, el objeto lo veremos azul.

Tabla 9. Intervalos de longitud de onda para diversos colores.

Color	Longitud de onda (nm)
azul	455-492
verde	492-577
amarillo	577-597
naranja	597-622
rojo	622-780

La luz blanca posee radiaciones (fotones) de longitudes de ondas comprendidas entre 400 y 780 nm (azul-rojo) que corresponden a energías comprendidas entre 3,2 y 1,6 eV. El color se produce cuando un material absorbe determinados valores de energía radiante y transmite otros. La energía absorbida en este rango y en el ultravioleta la emplean los átomos del material coloreado en pasar sus electrones a un nivel más alto de energía (*nivel excitado*) y solamente absorben aquellas energías que selectivamente necesitan. Sin tener en cuenta en estos apuntes, que parte de la energía absorbida se emplea en vibraciones y rotaciones de los conjuntos de átomos (moléculas e iones), la mayor parte de la energía absorbida en la región del visible se emplea en elevar los niveles electrónicos de los electrones de valencia y de entre estos niveles, las transiciones más frecuentes son entre orbitales d.

El estado excitado es inestable y los electrones caen a su nivel fundamental inicial. No lo hacen en un solo salto, pues el efecto sería globalmente nulo, sino en cascada de pequeños saltos que en total restituyen al medio la misma energía absorbida bajo la forma de varios fotones menos energéticos que el absorbido inicialmente (en parte se libera como relajación vibracional).

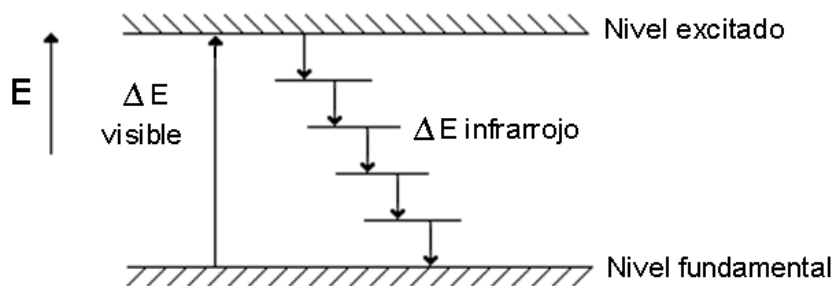


Figura 8. Proceso de relajación por emisión en cascada en el rango de infrarrojos.

Estas sucesivas emisiones se realizan en el rango de energías del infrarrojo, invisible para el ser humano y que produce la sensación de calor, elevando la temperatura (energía cinética) del material o del entorno.

4. FORMACIÓN DE LOS ELEMENTOS

Hemos visto de qué partículas están constituidos los átomos y cómo están distribuidas en su interior. También hemos visto las diferencias entre unos átomos y otros por el hecho de tener distinto número de partículas. En el siguiente apartado se estudiará la clasificación de los elementos según el número de protones, y por tanto de electrones, que tienen los átomos que forman los elementos que actualmente conocemos, en este apartado vamos a considerar, de forma muy resumida, la teoría que explica dónde y como se formaron y se forman los átomos de los elementos.

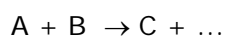
En el apartado 2 de este tema dejamos la historia de la formación del universo a los diez segundos de la "Gran Explosión" cuando habían empezado a aparecer las primeras partículas complejas. Ahora proseguiremos en la historia mostrando cómo se formaron los **núcleos** de los átomos, a los que se incorporan los electrones cuando las condiciones son de temperatura más baja y no entraremos a considerar cómo, a su vez, los átomos se combinan formando compuestos en las condiciones que, por ejemplo, tienen los planetas.

4.1. Formación de núcleos (nucleosíntesis) durante el Big Bang

La materia existente 10 s después del Big Bang fue: *protones*, *neutrones*, *neutrinos* y *electrones*. La **nucleosíntesis** produjo: ${}^1_1\text{H}$, ${}^4_2\text{He}$, ${}^3_2\text{He}$ y ${}^7_3\text{Li}$, a partir de protones y neutrones. **En este periodo los núcleos existentes son** el hidrógeno y el helio como mayoritarios y aún hoy, forman el 98% de la materia del universo.

4.2. Nucleosíntesis durante la evolución estelar. Reacciones de fusión

Fluctuaciones de densidad y la acción de la gravedad producen aisladas concentraciones de materia que son los núcleos de formación de galaxias y estrellas. Una densidad elevada implica un aumento de temperatura ($\gg 100\text{g/cm}^3$, 10^6K) y por tanto un aumento de energía cinética, por lo que los choques entre partículas son posibles superando la repulsión electrostática entre los núcleos de átomos ya formados que, al estar formados por protones y neutrones, son electropositivos. Los núcleos al chocar inician reacciones nucleares de fusión con gran desprendimiento de energía, que supone el nacimiento de una estrella. Las reacciones entre núcleos pueden esquematizarse en:



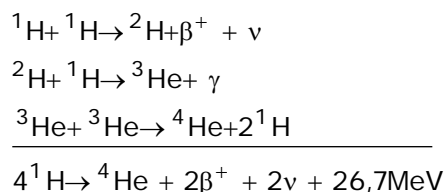
donde C es un núcleo de masa superior A y a B pero nunca alcanza la suma de la masa de A y B. La pérdida de masa se convierte en energía de acuerdo con la ecuación de Einstein:

$$\Delta E = \Delta mc^2 \quad (3)$$

Son pues *procesos exotérmicos* responsables de la luminosidad de la estrella. La vida de una estrella pasa por diferentes etapas, que describiremos a continuación.

4.2.1. Fusión de Hidrogeno: Estrella de la secuencia principal, estrella blanca

La mayoría de las estrellas están en la secuencia principal actualmente. Este período dura miles de millones de años. Cuanto más masiva es la estrella menos tiempo pasa en esta secuencia. Los procesos de fusión de hidrógeno pueden representarse por:



Cuatro núcleos de hidrógeno se fusionan para dar un núcleo de helio. La energía liberada por un gramo de hidrógeno al fusionarse equivale a veinte millones de veces la liberada en la combustión de un gramo de carbón.

Parte de la energía liberada actúa como fuerza expansiva que contrarresta la tendencia de la gravedad a contraer la estrella, el resto se libera por radiación. La estrella es estable durante mucho tiempo. Si la masa de la estrella no es grande el "combustible" se irá acabando y se convertirá en una **enana blanca**. No se producirá

otro tipo de reacciones por no poder vencer la repulsión electrostática. Si la masa es grande, cuando se ha fusionado el 10% del hidrógeno pasa a la fase siguiente.

4.2.2. Fusión de Helio: Gigantes rojas

El helio formado se acumulará en el centro de la estrella al ser más pesado. Tendremos entonces una estrella con un corazón en contracción formado por helio y una envoltura en expansión formada por hidrógeno. Cuando el centro adquiere densidades alrededor de 10^4 g/cm^3 y temperaturas de unos 10^8 K se producen procesos de fusión de helio que producen otros núcleos más complejos.

La estrella permanece estable pues la contracción del centro es compensada por la energía liberada en la fusión del He. En la envoltura exterior continúa la fusión de hidrógeno. La envoltura exterior se expande y se enfría y la estrella radia energía en la zona del rojo-infrarrojo, es ahora una ***gigante roja***. Esta es la situación de Betelgeuse, estrella de la constelación de Orión cuyo diámetro oscila en torno a los 600 millones de Km (400 soles) y de Antares, estrella de la constelación de Escorpión algo más pequeña que Betelgeuse.

Si la estrella no es muy masiva los "combustibles" se irán terminando poco a poco como en la situación anterior. Si la estrella es muy masiva, en el corazón se acumulan los núcleos más pesados alcanzando densidades de $5 \cdot 10^5 \text{ g/cm}^3$ y temperaturas de $5 \cdot 10^8 \text{ K}$ y se producen otras cadenas de procesos a partir del carbono preferentemente, formado en la fase anterior, así aparecen núcleos cada vez más complejos que al ser de mayor peso se van acumulando en el centro de la estrella donde a su vez se fusionan entre ellos. **En una estrella gigante roja se forman, en distintas proporciones, todos los núcleos de número atómico comprendido entre el del helio y el del hierro, excepto litio, berilio y boro.**

El hierro se acumula en el centro y, en capas concéntricas, los núcleos de los demás átomos según su masa. Mientras los procesos en las capas continúan, en el centro no se producen más fusiones con lo que la tendencia a la contracción no está compensada por desprendimiento de energía y aumentan la temperatura y la densidad ($3 \cdot 10^9 \text{ K}$ y 10^8 g/cm^3). La contracción del corazón de la estrella hasta sólo unos 50 Km provoca una situación inestable.

Si la estrella es poco masiva es posible que acabe sus reacciones de fusión contrayéndose hasta convertirse en lo que se llama una ***estrella de neutrones*** en la que la elevada densidad ha reunido todas las partículas hasta formar una más sencilla que son los neutrones, casi podemos decir que ha vuelto a su origen.

Si la estrella tiene una masa elevada, la inestabilidad de la situación produce una situación explosiva. En este momento el 98% de la materia todavía es hidrógeno y helio.

4.2.3. Nucleosíntesis explosiva: Supernovas

En el corazón de una estrella gigante roja, a tales densidades, las fuerzas atractivas nucleares se vuelven repulsivas y, el núcleo de hierro fundamentalmente, se desintegra en protones y neutrones y a su vez los protones capturan electrones para dar más neutrones.

Mientras la tendencia general de la estrella es la contracción, el corazón estalla y produce una onda de choque por toda la estrella. Es ahora una **Supernova**. En 1987 fue vista y estudiada una Supernova a la que se llamó SN1987A. Betelgeuse será una Supernova pronto, dentro de unos cien mil años.

El efecto global en cuanto a reacciones, es la formación en el corazón de la estrella de gran número de neutrones que producen los procesos globales de incorporar cada vez más neutrones a los núcleos pesados ya formados. Esto da lugar a núcleos enriquecidos de neutrones que favorecen las reacciones de emisión de partículas beta (e^-), las cuales forman núcleos de un número atómico mayor, al descomponerse un neutrón en un protón y un electrón. Este tipo de reacciones nucleares se llama reacciones de captura neutrónica.

Así, **por reacciones de captura neutrónica se forman núcleos más pesados que el hierro** hasta el límite impuesto por la estabilidad de tanta partícula reunida en un núcleo. Se forma un ciclo estable entre las reacciones de formación de elementos pesados y su fisión en varios de masa intermedia. Por encima de núcleos de masa 270 la fisión predomina y ello impide la formación natural de núcleos mayores de $A = 300$.

Con este ciclo termina la vida de la estrella en su primera generación. La explosión de la Supernova dispersa la materia por el espacio y si el corazón permanece, degenera en una estrella de neutrones o en un agujero negro¹. La materia dispersada por el Universo puede concentrarse en algunos lugares dando lugar a estrellas de segunda generación, como es nuestro sol, con sus sistemas planetarios. La formación de un sistema planetario sería asunto de otro tema.

4.2.4. Nucleosíntesis en estrellas de segunda generación

En estrellas de segunda generación con el 98% de H y He, la presencia de elementos más pesados produce muy variados procesos nucleares, de los cuales el más importante implica captura de neutrones con posterior emisión de electrones pero la diferencia con el proceso en supernovas consiste en que ahora el proceso produce

¹ Un agujero negro es una región del espacio que tiene tanta masa concentrada en él, que no hay para un objeto cercano ninguna posibilidad de escapar dada su fuerza de gravedad. Ni siquiera la luz puede escapar a su atracción.

isótopos más ligeros ya que la disponibilidad de neutrones es menor que en una supernova. Este proceso termina alrededor de núcleos de masa $A = 210-220$ por su corta vida-media.

La estrella de nuestro sistema, el sol, es una estrella de segunda generación que está en la fase inicial de fusión de hidrógeno. Esta fusión de hidrógeno tiene unos ciclos algo más complicados debido a la presencia de pequeñas cantidades de otros núcleos, los más importantes son el del hidrógeno PP I, el del Helio PP II y PP III y el del carbono CNO (no transcritos en estos apuntes) que llevan todos a la formación de He. Podrá estar en esta fase "tranquila" unos cinco mil millones de años, antes de pasar a ser gigante roja, pero nunca explotará como supernova ya que su masa no es suficientemente grande.

4.2.5. Nucleosíntesis en el medio estelar

Li, Be y B no se producen en las nucleosíntesis anteriores, no son estables en esas condiciones. Sólo algo de ${}^7\text{Li}$ se forma en la fase 1 y perdura, los demás ${}^6\text{Li}$, ${}^9\text{Be}$, ${}^{10}\text{B}$ no figuran en la composición de las estrellas. Estos elementos se han encontrado en el polvo interestelar y se supone que se generan por choque de rayos cósmicos (fundamentalmente H y He) con otros elementos. Sus reacciones de formación son endoenergéticas, necesitan gran energía que aportan los rayos cósmicos, pero la temperatura es baja y los núcleos formados pueden estabilizarse.

4.3. Resumen-conclusión

Como resumen-conclusión diremos que:

- a)** *Todos los núcleos de los elementos que figuran en la tabla periódica ($A < 300$), excepto Li, Be y B se generan en las estrellas a lo largo de su evolución, incluso los que consideramos artificiales como el Tc que no encontramos en la tierra porque ya desapareció por su corta vida-media. El helio en las estrellas blancas, los elementos ligeros, hasta el hierro, en las gigantes rojas, los más pesados en las supernovas.*
- b)** *Li, Be y B se generan en el polvo interestelar. Algo de ${}^7\text{Li}$ se genera durante el Big Bang.*
- c)** *Una vez generados los núcleos, los electrones se incorporan para formar átomos cuando la temperatura desciende lo suficiente para permitir su estabilidad y, simultáneamente, grupos de átomos que forman moléculas e iones.*
- d)** *En todas las situaciones presentadas se cumple el principio natural de "supervivencia de lo estable" y el de "tendencia al estado de menor energía" que llevó al Universo a formar elementos, moléculas y, al menos en nuestro planeta, VIDA.*

5. CLASIFICACIÓN DE LOS ELEMENTOS QUÍMICOS

La ciencia debe ordenar los conocimientos y respecto al conocimiento sobre la constitución de la materia existe la clasificación de los elementos en la que estos aparecen ordenados por su número atómico en filas y columnas, incluyendo su nombre, símbolo y datos sobre propiedades.

Antes de conocerse la estructura interna de los átomos ya se habían realizado múltiples intentos de clasificar los elementos, aunándolos en grupos de propiedades parecidas. Los primeros en realizar esto fueron *Meyer* (agrupándolos en base a las propiedades físicas semejantes) y *Mendeleiev* (en base a las propiedades químicas semejantes). Este último construyó una tabla periódica que condujo a buenos resultados, aunque con algún error en cuanto a la correlación de propiedades análogas. No obstante, Mendeleiev llegó a predecir propiedades de elementos aún desconocidos, y para ellos dejó "huecos". *Moseley*, en 1912, condujo al actual sistema periódico, al ordenar los elementos no por su peso atómico sino por su número atómico creciente. Con esta nueva tabla se corregían las anomalías de Mendeleiev.

Se puede justificar ya el sistema periódico a partir de la configuración electrónica de los elementos. Las filas del sistema periódico se llaman **períodos** y las columnas, **grupos**. En el primer periodo hay dos elementos (H y He). El siguiente consta de 8 elementos (del litio al neón). El tercer periodo consta también de 8 elementos (del sodio al argón).

En el periodo cuarto existen diez elementos más que en los anteriores. Comienza por el potasio, sigue con el calcio, pero al llegar al elemento con $Z = 21$ (escandio) el electrón siguiente no se coloca en el orbital 4p, sino en uno de menor energía, el 3d. Así comienza un conjunto de 10 elementos en los que se van introduciendo hasta un total de 10 electrones en los 5 orbitales 3d. Cuando éstos ya están llenos, el electrón siguiente pasa a un 4p, y así hasta el kriptón. En el quinto periodo ocurre algo análogo, hay 18 elementos.

El sexto periodo comienza con el cesio, y al llegar al elemento $Z = 57$, el lantano, el electrón correspondiente no se introduce en un orbital 5d, sino en un orbital 4f, de menor energía. Comienza así una nueva serie en la que se van llenando esos 7 orbitales 4f y que corresponderá, por lo tanto, 14 elementos (denominados lantánidos). Al llegar al elemento siguiente, el electrón se vuelve a colocar en un orbital 5d, y así sucesivamente.

En el séptimo y último periodo vuelve a suceder lo mismo. Al llegar al actinio y pasar al elemento siguiente, el electrón se sitúa en un orbital 5f, comenzando así otra serie de 14 elementos, denominados actínidos. Estos elementos son inestables, no existiendo muchos de ellos en la naturaleza.

Como resumen, diremos que en el sistema periódico pueden distinguirse los siguientes tipos de elementos:

- **Elementos de los grupos principales:** Son 8; corresponden a las estructuras electrónicas: ns^1 , ns^2 , ns^2np^{1-6} . Es decir, *metales alcalinos, alcalinotérreos, grupos del boro, del carbono, del nitrógeno, del oxígeno (anfígenos), halógenos y gases nobles*, respectivamente.
- **Elementos de transición:** Series de 10 elementos, de configuración $ns^2(n-1)d^{1-10}$, en los períodos 4, 5 y 6 (*1ª, 2ª y 3ª series de transición*, respectivamente). En el periodo 7 la serie de transición está incompleta, acabándose el sistema periódico. En todos los elementos de transición se están llenando los orbitales de la penúltima capa, $(n-1)d$.
- **Elementos de transición interna:** Series de 14 elementos, situada cada serie en los períodos 6 y 7. En ellas se están llenando los orbitales f de la antepenúltima capa, $(n-2)f$. No tienen cabida en la tabla periódica, por lo que se sitúan fuera de ella. Estarían incluidos dentro de las casillas del lantano y del actinio, por lo que, tal y como hemos citado anteriormente, se denominan *lantánidos y actínidos*, respectivamente.

Por lo tanto cada período comienza con un alcalino y termina con un gas noble. Examinando las configuraciones electrónicas externas (orbitales más externos, de mayor energía) de cada grupo del sistema periódico, resultan ser:

Metales alcalinos: ns^1

Metales alcalinotérreos: ns^2

Metales de transición: $ns^2(n-1)d^{\text{variable}}$

Metales de transición interna: $ns^2(n-1)d^{0-2}(n-2)f^{\text{variable}}$

Grupo del boro: ns^2np^1

Grupo del carbono: ns^2np^2

Grupo del nitrógeno: ns^2np^3

Anfígenos (grupo del oxígeno): ns^2np^4

Halógenos: ns^2np^5

Gases nobles: ns^2np^6

El número n del nivel más externo es igual al número del período. En los elementos de transición y en los lantánidos y actínidos, en algunos casos hay pequeñas alteraciones en la ocupación de los orbitales más externos, debido a que las diferencias energéticas entre éstos son sumamente pequeñas pero, en general, las configuraciones electrónicas son las indicadas.

Resulta así que todos **los elementos situados en una misma columna tienen igual configuración electrónica externa**. Por otra parte, en el sistema periódico los elementos se encuentran ordenados de tal forma que en la misma columna están situados los de propiedades químicas parecidas. Luego se puede deducir que **las propiedades químicas dependen de la configuración electrónica externa** y así se ha comprobado experimentalmente.

Hay que resaltar que en los elementos de transición de un mismo período el número de electrones del orbital más externo es igual, ns^2 (lo que varía de uno al siguiente es el número de electrones en los orbitales d), por lo que habrá gran semejanza en sus propiedades químicas, siendo casi mayor dicha semejanza en sentido horizontal (mismo período) que en sentido vertical (mismo grupo). Este mismo fenómeno ocurre en los elementos de transición interna y, además, mucho más acusadamente, ya que los elementos de cada una de esas series poseen aún más orbitales externos con el mismo número de electrones, $(n-1)s^2(n-1)p^6(n-1)d^{0-2}ns^2$.

Por último, los gases nobles tienen completos los orbitales externos. Como, por otra parte, la experiencia demuestra que son elementos muy poco reactivos, esa gran estabilidad puede atribuirse a la configuración electrónica con orbitales completos.

5.1. Propiedades periódicas

Se ha observado una periodicidad en las propiedades de los elementos en cada línea horizontal y vertical del sistema periódico. Este hecho está de acuerdo con la ley de periodicidad enunciada ya por Mendeleiev y obtenida de una forma meramente empírica: *Las propiedades de los elementos no son arbitrarias, sino que dependen de su estructura y varían con el peso atómico de modo sistemático pero no dependen de él sino del número y disposición de los electrones externos*. A continuación se estudiarán alguna de estas propiedades periódicas más importantes.

5.1.1. Radio atómico

Como no es posible medir el radio atómico de un elemento aislado, para estudiar su variación en el sistema periódico (S.P.) se acude a la representación gráfica del volumen atómico, obtenido según el cociente masa atómica/densidad del elemento, frente al número atómico.

Se observa que en un mismo periodo el elemento de mayor volumen atómico es el metal alcalino, y que a medida que se avanza en ese periodo va disminuyendo, con ligeras irregularidades, para volver a aumentar al llegar al metal alcalino del periodo siguiente y que, además, tiene un volumen superior al del metal alcalino anterior.

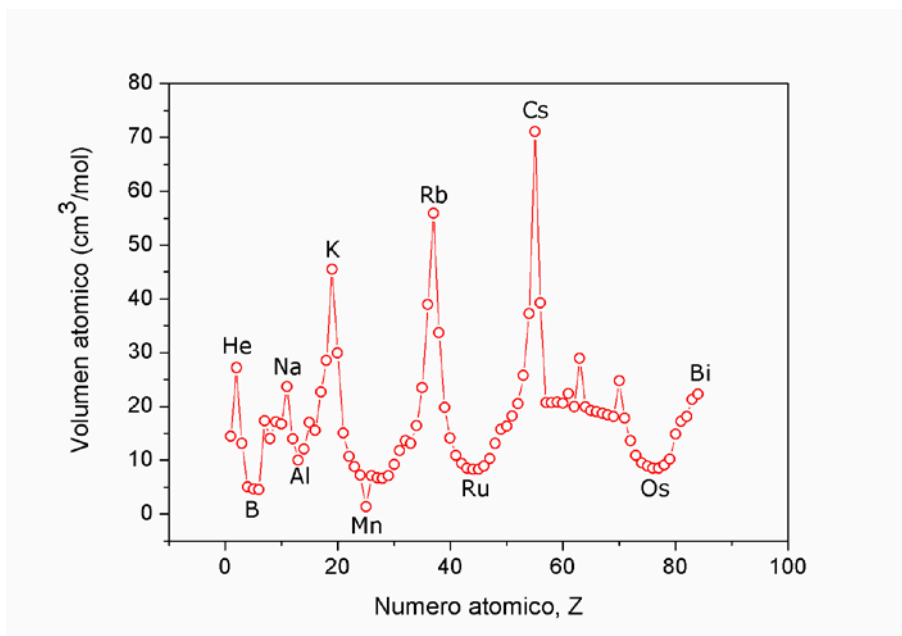


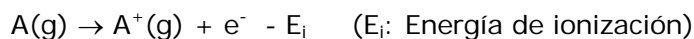
Figura 9. Variación del volumen atómico con el número atómico.

Estas variaciones en el S. P. pueden interpretarse teóricamente:

- En un mismo grupo, el radio atómico aumentará con el número cuántico principal, n , de la capa externa, es decir, al descender en ese grupo.
- En un mismo periodo todos los elementos tienen el mismo valor de n externo, pero al avanzar hacia la derecha va aumentando la carga positiva del núcleo por adición sucesiva de un protón. Como la carga positiva del núcleo está muy concentrada en un espacio muy pequeño, el campo eléctrico creado por ella aumenta mucho, con lo cual atrae más a los electrones y las capas electrónicas se "comprimen". Por lo tanto, al avanzar en un periodo el radio, en general, disminuye.

5.1.2. Energía de ionización

La energía de ionización se define como el cambio de energía al llevar al electrón más externo de un átomo gaseoso (es decir, el electrón unido con menos energía) hasta el infinito y producir así un ión positivo también en estado gaseoso, supuesto realizado este proceso a la temperatura de 0 K.



Es un proceso endoenergético que mide la tendencia de un átomo para formar iones positivos. Cuanto menor sea la energía de ionización, más fácil será arrancarle un electrón y mayor será su tendencia a formar iones positivos. En un periodo aumenta con Z, siendo el gas noble el de mayor energía de ionización. Al pasar al siguiente periodo, el valor es inferior al del correspondiente elemento del mismo grupo del periodo anterior.

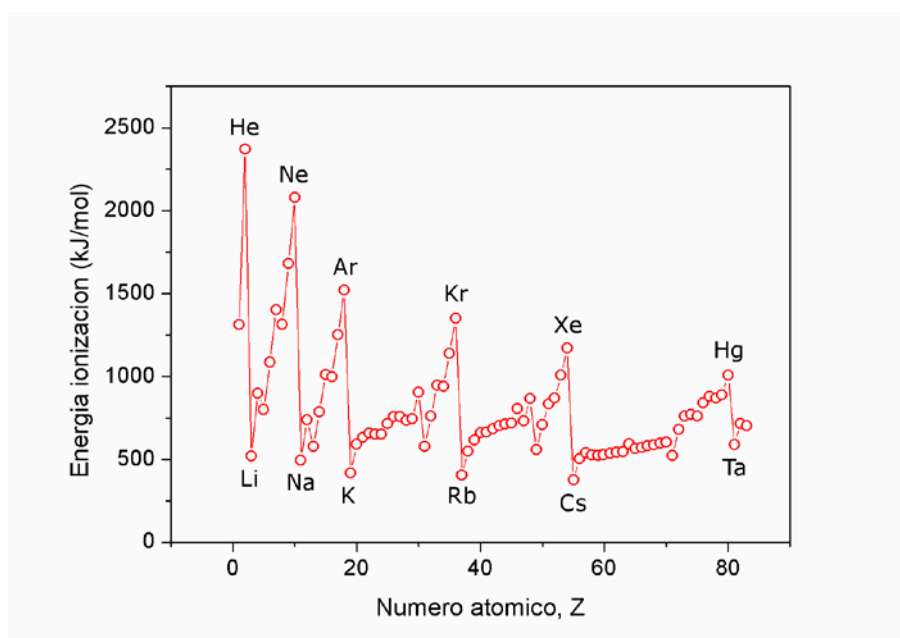


Figura 10. Variación de la primera energía de ionización con el número atómico.

Esto se justifica del siguiente modo:

- Al descender en un grupo, el número n de la capa más externa aumenta y el radio atómico también. Al estar más separado el electrón externo, la acción del núcleo sobre él es menor y se necesita menos energía para separarlo; es decir, *la energía de ionización disminuye al descender en el grupo*.
- En un periodo n es igual, pero de izquierda a derecha aumenta la carga nuclear, con lo cual la atracción del núcleo es mayor y la energía de ionización también aumenta en este sentido, aunque existen algunas irregularidades en esta gradación.

Existen también una segunda, tercera, etc., energías de ionización. Al ión A^+ se le podría arrancar un nuevo electrón: $A^+ \rightarrow A^{2+} + 1e^- E_2$, y a A^{2+} otro electrón, cumpliéndose que: $E_1 < E_2 < E_3 < \dots$, ya que al haber menos electrones la atracción del núcleo sobre ellos es mayor. Por este motivo sólo son estables, en general, los iones positivos con una o dos cargas, y es muy difícil obtener cationes con más de tres.

5.1.3. Afinidad electrónica

Es el cambio de energía en el paso de un electrón, con energía cinética cero, desde el infinito hasta el orbital disponible de menor energía de un átomo gaseoso, para formar así un ión negativo también gaseoso, supuesto realizado el proceso a la temperatura de 0 K.



Es un proceso exoenergético. Mide la tendencia para formar iones negativos: *A mayor afinidad electrónica más energía se desprende en ese proceso y mayor será la tendencia del elemento a formar iones negativos.*

Es más difícil la determinación experimental de esta magnitud que la de las energías de ionización. Su variación en el S.P. es análoga a la de las energías de ionización, aunque con más irregularidades, puesto que también aumenta con la atracción nuclear. Es decir, en general disminuye en un grupo cuando aumenta el número cuántico principal del orbital más externo y aumenta con el número atómico cuando n es el mismo.

También existen segunda, tercera, ... afinidades electrónicas, pero los procesos ya son endoenergéticos, pues se aproxima un electrón a iones negativos, con lo cual habrá que vencer una repulsión electrostática.

5.1.4. Electronegatividad

Esta es otra propiedad periódica. *Según la definición de Pauling es el poder o tendencia de un átomo, dentro de una molécula, de atraer hacia sí los electrones de su enlace con otro átomo.* Está, pues, íntimamente relacionada con la energía de ionización y la afinidad electrónica. Sin embargo, no se puede medir directamente, sino que ha de hacerse en relación a otro elemento. Por ello hay dificultades en su determinación y se han establecido distintas escalas. En todas, los elementos de mayor energía de ionización y de mayor afinidad electrónica son los de electronegatividad más elevada. Por ello, también habrá una variación periódica de la electronegatividad a lo largo del S.P. y en el mismo sentido de aquellas otras dos propiedades periódicas.

5.1.5. Otras propiedades

Carácter Metálico: Los metales son elementos con tendencia a perder electrones y formar iones positivos, por lo que tanto la afinidad electrónica como la energía de ionización, así como la electronegatividad son bajas. Tienen pocos electrones externos. Todo lo contrario ocurre en los no metales.

Dentro de los metales hay que distinguir los metales de los grupos principales, los de transición y los de transición interna. Los metales más activos, los de mayor carácter metálico, son los situados más abajo y más a la izquierda del S.P. y los no metales más activos, por el contrario, se hallan en la parte superior derecha, excluyendo a los gases nobles.

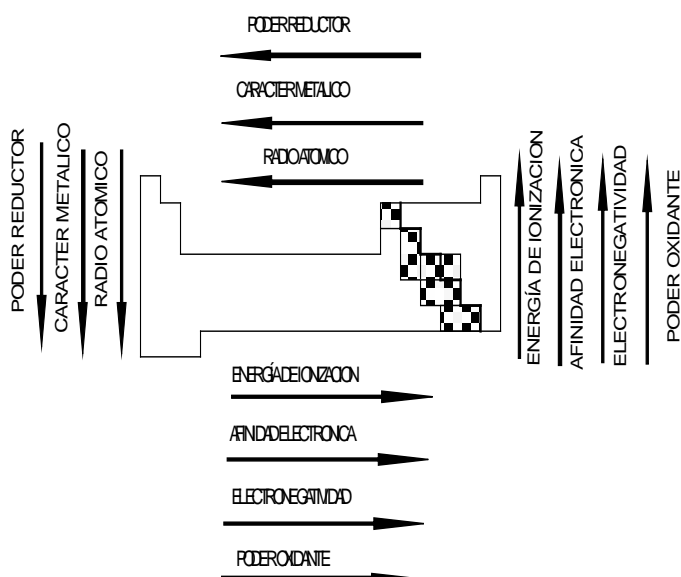


Figura 11. Resumen de las propiedades periódicas de los elementos.

Podría trazarse en el S.P. una línea divisoria, casi en diagonal, *metales - no metales*. Los elementos próximos a esta línea muestran muchas veces propiedades intermedias (*semimetales o semiconductores*).

Otras propiedades son: carácter reductor u oxidante de un elemento, carácter de los hidruros, acidez o basicidad de los compuestos hidroxigenados, o valencia. Todas ellas están relacionadas con la electronegatividad.

6. FUENTES NATURALES DE LOS ELEMENTOS EN LA TIERRA

En la Tierra, los elementos pueden obtenerse a partir de algunos de sus compuestos, como se indica en la figura 12.

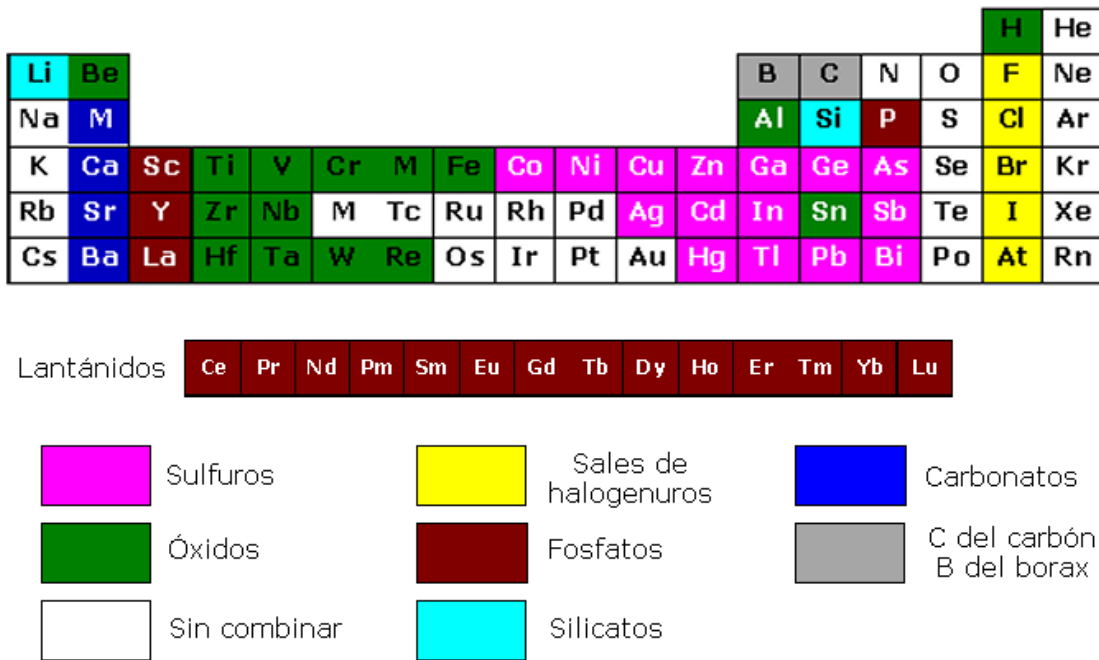


Figura 12. Fuentes naturales de los elementos. Las sales de los halogenuros solubles se encuentran en el océano o en depósitos sólidos. La mayor parte de los gases nobles se obtienen del aire.

6.1. Abundancia relativa de los elementos

A continuación se especifican la abundancia de los elementos químicos en el cosmos, en el sol, en la atmósfera, en la corteza terrestre y en los seres vivos:

En el cosmos: H₂ 90%, He 9%, 1% (O₂, Ne, N₂, C, ...).

En el sol: H₂ 81.76%, He 18.17%, 0.07% restantes.

En la atmósfera terrestre: N₂ 78.1%, O₂ 20.9%, resto CO₂ y gases nobles.

En la corteza terrestre: O 45.9%, Si 26.9%, Al 7.9%, Fe 5.9%, Ca, 4.9%

Resto: Ne, Mg, K, Ti, H, P, Mn, F, S, Sr, Ba, C, Cl, ...

En los seres vivos: principalmente la materia orgánica está compuesta de C, O, H.

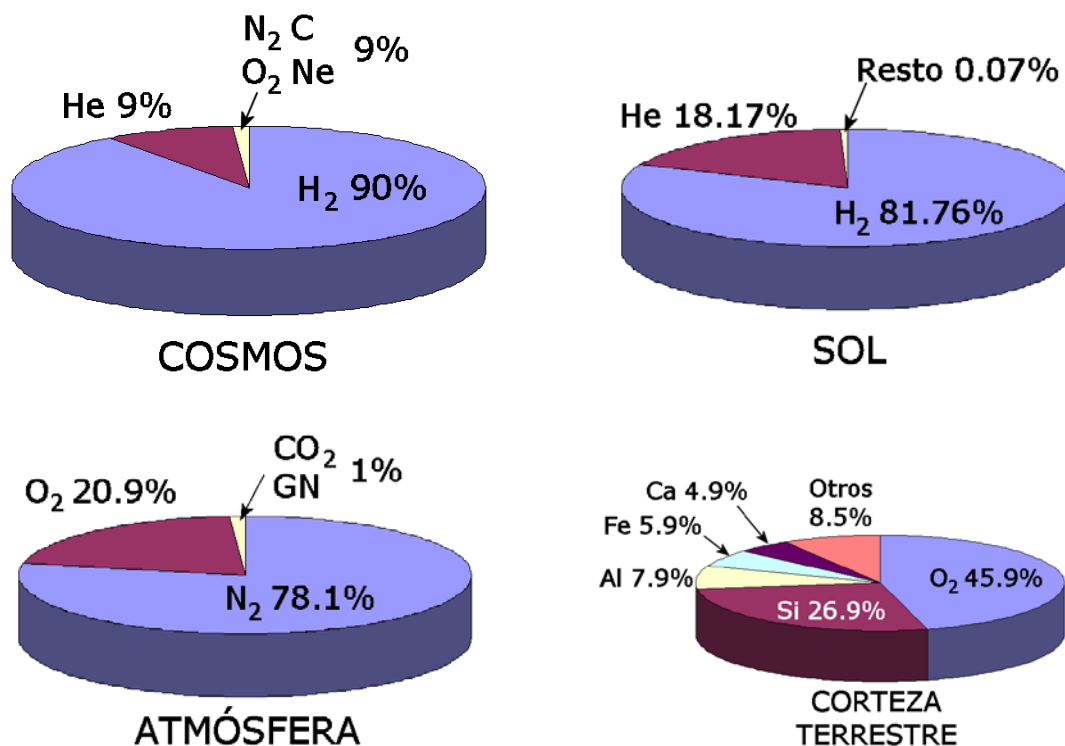


Figura 13. Proporciones de los elementos químicos en el universo, el sol, la atmósfera y la corteza terrestre.

7. MOLÉCULAS E IONES

Hasta ahora hemos estudiado los átomos aislados. Sin embargo, el mundo que nos rodea está integrado por elementos combinados entre sí (excepto los gases nobles).

Existen átomos que se combinan entre sí, es decir, que dan lugar a especies poliatómicas estables de propiedades diferentes a las de los átomos de partida. Sin embargo, hay átomos que no pueden formar estas combinaciones estables. Para comprender estas diferencias hay que considerar los cambios energéticos que pueden producirse cuando dos átomos cualesquiera, A y B, se aproximan lo suficiente para poder interactuar.

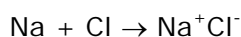
Kossel, en 1916, dio una primera explicación a la existencia de fuerzas atractivas; dicha explicación fue ampliada posteriormente por Lewis en su regla del octete: *Los átomos forman enlaces perdiendo, ganando o compartiendo los electrones*

necesarios para alcanzar las configuraciones electrónicas externas de los gases nobles (se llama octete porque todos los gases nobles, excepto el helio, tienen 8 electrones externos). Refiriéndonos al esquema de Energía-Materia del tema 2 de esta asignatura, un enlace químico es una interacción entre electrones de distintos átomos de forma que el conjunto de los átomos que se enlazan logra tener menor energía potencial que la situación de átomos separados.

Actualmente, son otras teorías mucho más elaboradas y complejas las que dan una interpretación de los distintos tipos de enlaces químicos.

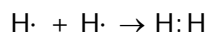
8. TIPOS DE ENLACES

Enlace Iónico: Algún/os electrón/es de uno de los átomos se separa/n completamente de él, cayendo bajo la influencia única del otro átomo:



Siempre dan lugar a **sólidos cristalinos** llamados **iónicos**.

Enlace Covalente: No hay transferencia de electrones de un átomo a otro, sino compartición de electrones por los dos átomos. Cada electrón del enlace estará, pues, bajo la influencia de los dos átomos:



Siempre dan lugar a moléculas que pueden estar en forma de gas, líquidos o sólidos (sólidos moleculares y sólidos atómicos, véase más adelante).

Estos dos modelos son el límite y entre ellos hay una gradación continua de casos intermedios en función de la polaridad del enlace. Participando de características del enlace iónico y del covalente existen:

Enlace Metálico: Característico de elementos con electrones poco ligados (metales). No existe transferencia de electrones pues no hay diferencia de electronegatividad entre los átomos que se enlazan, ni existe tampoco una formación de parejas de electrones que se enlazan. Los electrones de la última capa de los átomos son compartidos por todos los átomos que forman el metal. Dan lugar a metales sólidos o líquidos.

Además existen otros tipos que se consideran **enlaces residuales entre moléculas**, de energía muy inferior. No se puede hablar de verdadero enlace químico.

Son atracciones electrostáticas entre dipolos de las moléculas. Así podemos citar: Enlace de Van der Waals y Enlace de Hidrógeno.

8.1. Enlace iónico

Está constituido por elementos de electronegatividad muy diferente; es decir, por un metal y un no metal. Dicho enlace se origina por la atracción electrostática entre iones de carga opuesta, y estos iones se forman, a su vez, al producirse una transferencia completa de electrones entre los átomos del enlace.

Es característico de los compuestos iónicos el ser sólidos cristalinos en condiciones ordinarias de presión y temperatura, ya que los iones se hallan dispuestos en los nudos de redes cristalinas de distintos tipos. En los sólidos iónicos no se puede hablar de moléculas, ya que el cristal será él mismo una enorme molécula, o macromolécula, constituida por un elevadísimo número de iones de cargas opuestas.

En el proceso de formación de los sólidos iónicos ha de tenerse en cuenta la llamada **energía reticular, U_0** (*energía potencial*) que es el cambio de entalpía producido al aproximar los iones gaseosos, situados a una distancia infinita, hasta sus posiciones en el cristal (referida a un mol de compuesto). A mayor valor de la energía reticular más energía se desprenderá (en forma de calor aumentando la temperatura del entorno) en la formación del cristal y éste será más estable (disminuye su energía potencial). Por tanto, el conocimiento del valor de la energía reticular es muy importante, pues da una medida directa de la estabilidad del cristal. El tamaño de los iones influye de forma decisiva en la estructura de las redes cristalinas, siendo éste simplemente un problema geométrico.

Se denomina **valencia iónica o electrovalencia** a la capacidad de los átomos para perder o ganar electrones y formar iones, llegando a una configuración electrónica más estable. Para conocer los iones que formarán los elementos hay que recurrir a su configuración electrónica externa. La valencia iónica de los elementos que constituyen cada uno de los grupos es la siguiente:

- Metales alcalinos: M^+
- Metales alcalinotérreos: M^{2+}
- Metales de transición del grupo IIIB: M^{3+}
- Metales de transición de los grupos IVB a VIIIB: Iones de +1 a +3 cargas.
- Metales de transición de los grupos IB y IIB: Pueden perder 1 ó 2 electrones.
- Metales de posttransición: Sólo algunos forman iones positivos, por ejemplo Al^{3+} , Sn^{2+} , Pb^{2+} .

- Familia del carbono: Prácticamente imposible formar aniones con 4 cargas negativas.
- Familia del nitrógeno: Forman aniones difícilmente.
- Familia del oxígeno: X^{2-} .
- Familia de los halógenos: X^- .
- Gases nobles: Ni aniones ni cationes.

8.2. Enlace covalente

Como una idea muy simplificada podemos decir que cada enlace resulta de la compartición de dos electrones, proveniente cada electrón de cada uno de los átomos, en los que se encontrarían desapareados. De esta forma, se compartirían todos los electrones necesarios hasta que los átomos adquiriesen la configuración de gas noble. Cada par de electrones compartidos constituye así un enlace covalente. Este tipo de enlace se formará, pues, entre átomos de electronegatividad parecida, normalmente entre elementos no metálicos.

8.2.1. Parámetros moleculares

Los parámetros moleculares que caracterizan el enlace covalente son: *longitud*, *ángulo*, *energía* y *polaridad del enlace*. Sirven para caracterizar e identificar a las moléculas covalentes. A continuación describiremos estos parámetros moleculares.

Longitud de enlace (o distancia de enlace): Es la distancia "*media*" entre los núcleos de dos átomos unidos por enlace covalente. Es la distancia *media* porque, en realidad, los núcleos están vibrando alrededor de una posición de equilibrio.

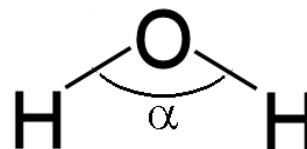


Figura 14. Ángulo (α) de enlace entre átomos.

Ángulo de enlace: Es el ángulo entre dos "líneas" de enlaces adyacentes. Así en el H_2O , sería el ángulo entre los dos enlaces O-H, es decir, entre las dos líneas hipotéticas que unen los núcleos del oxígeno y del hidrógeno (figura 14).

Energía de disociación: Para una molécula diatómica se define energía de disociación como la energía necesaria para disociar un mol de esas moléculas, en estado gaseoso, en sus dos átomos, también en estado gaseoso, suponiendo que este proceso ocurre a la temperatura de 0 K. Es decir,



Energía de enlace: Es la energía implicada en el proceso inverso, formación de la molécula a partir de sus átomos, en estado gaseoso. Es igual a la de disociación, pero de signo opuesto.

En moléculas poliatómicas la energía de enlace entre dos átomos determinados depende de la naturaleza del estado de la molécula, pero generalmente la variación es lo suficientemente pequeña para poder tabular las energías de enlace promedio como buena aproximación.

Polaridad de los enlaces: Cuando los dos átomos de una molécula covalente diatómica son idénticos (*molécula homonuclear*), el par de electrones está igualmente compartido por los dos átomos. Sin embargo, si los dos átomos son distintos (*molécula heteronuclear*) el par de electrones ya no está compartido por igual por ambos átomos, a no ser que éstos tengan la misma electronegatividad. Así, en la molécula A-B (figura 15) a mayor diferencia de electronegatividad entre A y B, mayor desigualdad habrá en la compartición del par electrónico, ya que el más electronegativo (B) atraerá más hacia sí esos electrones. Esta densidad en la compartición electrónica provoca, a su vez, una polaridad en el enlace porque el centro geométrico de las cargas positivas no coincide con el de las cargas negativas y la molécula es un pequeño dipolo. Se dice que el *enlace es polar*, lo que se indica por δ^+ y δ^- , significando δ la fracción de carga eléctrica que aparece sobre cada átomo. Esta desigualdad se mide cuantitativamente por el *momento eléctrico dipolar* o, simplemente, **momento dipolar**.

El que los enlaces covalentes sean polares significa que ya no son covalentes puros, sino que tienen cierto carácter iónico. Lógicamente, el carácter iónico de un enlace será más alto cuanto mayor sea su momento dipolar, o lo que es lo mismo, cuanto mayor sea la diferencia de electronegatividad entre los dos átomos.

Hemos dicho que en moléculas diatómicas el carácter iónico del enlace está directamente relacionado con el valor de su momento dipolar. En moléculas poliatómicas el momento dipolar total será la suma de los momentos individuales de los distintos enlaces de la molécula. Si en la molécula A-B las electronegatividades de A y B son diferentes, el enlace será covalente parcialmente iónico y su energía de disociación resultará mayor que si fuera covalente puro.

Valencias covalentes: En principio, se tendrá en cuenta que un átomo dará lugar a tantos enlaces covalentes como electrones desapareados tenga. Para ello debemos fijarnos en su configuración electrónica externa. Los electrones desapareados y por tanto los posibles enlaces a formar de los diferentes elementos serían:

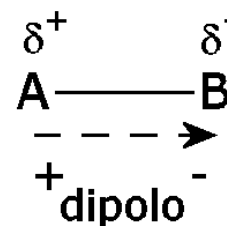


Figura 15. Dipolo entre dos átomos.

- Período 1: H, 1 enlace; He, ninguno.
- Período 2: Li, 1 enlace; Be, 2 enlaces; B, 3 enlaces; C, 4 enlaces; N, 3 enlaces; O, 2 enlaces; F, 1 enlace; Ne, ninguno.
- Período 3: Na, 1 enlace; Mg, 2 enlaces; Al, 3 enlaces; Si, 4 enlaces; P, 3 y 5 enlaces; S, 2, 4 y 6 enlaces; Cl, 1, 3, 5 y 7 enlaces.

Con los demás elementos de los siguientes períodos ocurre lo mismo. Los metales de transición podrán formar también enlaces covalentes y al ir aumentando el número de electrones **d** pueden llegar hasta valencia covalente 7, e incluso 8. Ejemplo: MnO_4^- (Mn, 7); $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ (Cr, 6).

A partir de 1926 se dio un tratamiento mecánico-cuántico al enlace covalente. Como la solución para la ecuación de ondas para sistemas polieletrónicos y polinucleares es sumamente compleja, han de utilizarse métodos aproximados. Existen dos teorías que estudian el enlace covalente: la Teoría del Enlace Valencia (EV) y la Teoría de Orbitales Moleculares (OM), ambos suponen la interacción entre orbitales atómicos semioocupados para formar una situación distinta más estable que la inicial.

8.3. Enlace metálico

Observando el Sistema Periódico se comprueba que la mayoría de los elementos, alrededor del 90%, son metales. Al estudiar la estructura de estos elementos se comprobó que todos (excepto el Hg) son sólidos cristalinos y que, además, había un empaquetamiento compacto de las partículas en los cristales; es decir, que el número de coordinación del cristal (que es el número de átomos que rodean a cada uno de los átomos que forman el metal) es muy elevado (12 y, a veces, 8). A partir de este dato y de una de las características más importantes de los metales, su alta conductividad eléctrica, podría considerárseles como un conjunto de iones positivos, empaquetados en unos retículos cristalinos y dejando entre sí el menor espacio posible. Entre los intersticios de estos cristales habrá un enorme número de electrones con gran movilidad (mar electrónico), que justificaría su conductividad.

8.4. Enlace entre moléculas

8.4.1. Fuerzas intermoleculares o de Van der Waals

Pueden considerarse dos clases de interacciones de este tipo: *de dispersión* y *de orientación*.

Fuerzas de dispersión o de London: El movimiento de los electrones en el átomo da lugar a que en un momento concreto no coincida el centro geométrico de carga negativa de la nube electrónica con el centro geométrico de carga positiva del núcleo. Es decir, en cada momento los átomos se comportan como pequeños dipolos instantáneos, aunque al cabo de un cierto tiempo, por muy corto que sea, su resultante es nula. Además, un dipolo de éstos puede crear dipolos análogos en los átomos próximos (dipolos inducidos) y, en definitiva, los dipolos contiguos interaccionarán entre sí. Estas fuerzas de interacción se denominan **de dispersión o de London**. Sólo son importantes a distancias muy pequeñas, pues disminuyen rápidamente al aumentar aquella.

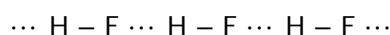
Estas interacciones se hacen más fuertes al aumentar la masa atómica o molecular, puesto que habrá más electrones. Además, al ser mayor el volumen de los átomos o moléculas implicados, los electrones externos serán atraídos menos fuertemente por el núcleo, y todos los dipolos serán más grandes.

Estas fuerzas intermoleculares de dispersión son muy débiles en comparación con la fuerza de los enlaces intramoleculares. Por este motivo, muchas veces no se notan, pero existen siempre.

Fuerzas de orientación o dipolo-dipolo: Son fuerzas de interacción entre moléculas que son polares, es decir, que tienen un momento dipolar permanente. Así, la molécula Cl-F es un pequeño dipolo, por lo que las moléculas interaccionan atrayéndose mutuamente por sus dipolos opuestos. Lógicamente, son unas fuerzas más intensas que las anteriores. Ambos tipos de fuerzas, pese a su importancia, no son un verdadero enlace químico, por tratarse de interacciones muy débiles.

8.4.2. Enlace de Hidrógeno

Este es un nuevo e importantísimo tipo de fuerzas intermoleculares, también de interacción dipolar que, aunque se suelen incluir entre las de Van der Waals, se estudian aparte debido a sus características especiales. Aparecen cuando en una molécula un átomo de hidrógeno está unido por un enlace covalente a un elemento muy electronegativo y pequeño, A (por ejemplo, O, F, N, ...) y a través de ese hidrógeno la molécula puede unirse a otra en la que también exista un átomo muy electronegativo, B. El tamaño tan pequeño del átomo de hidrógeno permite que el átomo B se le aproxime mucho, lo que da lugar a la aparición de esta unión. Así, en el H-F tendremos:



Para la molécula de H₂O, los enlaces de Hidrogeno se formarían tal y como es posible observar en la figura 16.

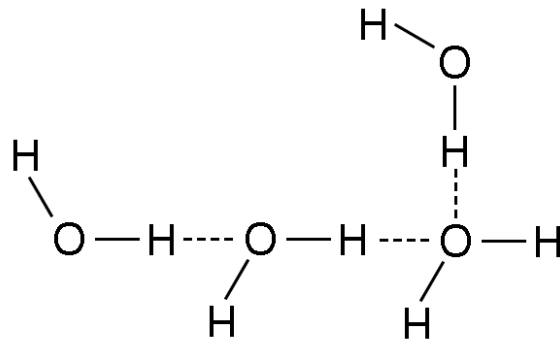


Figura 16. Enlaces de Hidrógeno en el agua.

Las condiciones para que exista este tipo de enlace son, pues, que los átomos A y B sean muy electronegativos y, además, que estén muy próximos. Según esto, una molécula puede unirse bien a otra igual (compuesto asociado), bien a una molécula diferente con un átomo muy electronegativo.

La energía de este enlace es mucho menor que la del enlace iónico o covalente. Es decir, es intermedio entre las otras fuerzas intermoleculares y los enlaces químicos. Tampoco constituyen, pues, un verdadero enlace químico. Sin embargo, como ocurría en las fuerzas de Van der Waals, aunque no sean intensas, son importantes por su gran número.

Las moléculas que pueden formar este tipo de enlace forman sustancias que tienen características que las hacen distintas de las que por el tipo de elementos o por su peso molecular deberían ser parecidas. Por ejemplo, el agua tiene un punto de fusión y de ebullición muy elevado comparado con el metano o el amoníaco, su sólido tiene menor densidad que su líquido y una capacidad calorífica elevada, características que hacen de ella una sustancia muy especial que, como además es muy abundante en nuestro planeta, condiciona el clima y muchos fenómenos atmosféricos, y la vida.

9. PROCESOS QUÍMICOS

Se llama **proceso químico** a una modificación de la materia que suponga un cambio sustancial, es decir las sustancias iniciales son distintas de las sustancias finales. En los cambios químicos se rompen y se forman enlaces químicos, es decir, los enlaces debidos a la interacción electromagnética de los electrones de la capa exterior de los átomos.

Los primeros estudios sobre los cambios químicos dieron lugar a las primeras leyes y a la primera teoría sobre la constitución de la materia. Estas fueron muy anteriores en el tiempo (aproximadamente un siglo) a lo que acabamos de exponer sobre la estructura electrónica del átomo.

9.1. Leyes ponderales

Estas leyes mostraban el comportamiento de la materia en sus transformaciones pero no explicaban por qué se producían estos comportamientos lo hacía así. Estas leyes suponen el comienzo de la Química como ciencia, y se denominan así porque se utilizaron datos basados en medidas de peso (ponderales) contrastadas. Estas leyes son:

Ley de la Conservación de la masa (de Lavoisier, 1789): "La materia no se crea ni se destruye, sino que se transforma". Esto quiere decir que el peso total de las sustancias que reaccionan (reactivos) es igual al peso total de las sustancias que resultan (productos). En la figura 17(a) se muestra el ejemplo de la formación de agua.

Ley de la Composición definida o constante (Proust): "Cuando dos o más elementos (o compuestos) se unen para formar un mismo compuesto lo hacen siempre en una proporción en peso fija".

Considerada desde el punto de vista del análisis, esta ley supone que al descomponer cualquier compuesto encontramos siempre la misma relación en peso entre sus elementos.

Ley de las Proporciones Múltiples (Dalton, 1802): "Las cantidades de un mismo elemento que se combinan con una cantidad fija de otro para formar varios compuestos están en la relación de los números enteros sencillos".

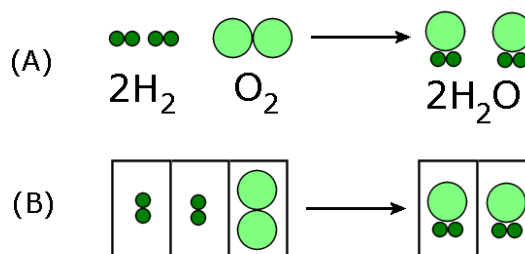


Figura 17. A) En una reacción química la masa se conserva. B) El volumen no se conserva, sino que varía con el número de moléculas (de tres volúmenes se pasa a dos volúmenes)

Ley de los pesos de combinación o de las proporciones equivalentes (Richter): "Los pesos de diferentes sustancias que se combinan con un mismo peso de otra, dan la relación en que ellos se combinan entre sí (o multiplicada por un número sencillo)".

Esto conduce a fijar a cada elemento un número que representa su peso de combinación relativo a los demás. Cuando dos elementos reaccionan entre sí, lo hacen en cantidades en peso proporcionales a sus pesos de combinación.

9.2. Teoría Atómica de Dalton

Las leyes de las combinaciones químicas anteriores, totalmente experimentales y sin conexión entre sí, fueron reunidas y aplicadas por Dalton, en 1808, partiendo de una misma base teórica. Dalton supuso que la materia era discontinua y que estaba formada por partículas indivisibles: **los átomos**.

Con más detalle, su teoría atómica afirma que:

1^{er} Postulado.- Los elementos están constituidos por átomos, partículas discretas de materia, que son indivisibles e inalterables.

2^o Postulado.- Todos los átomos de un mismo elemento son idénticos en masa y propiedades.

3^{er} Postulado.- Los átomos de distintos elementos tienen diferente masa y propiedades.

4^o Postulado.- Los compuestos se forman por la unión de átomos de los correspondientes elementos en una relación constante y sencilla en número.

Esta teoría de Dalton explica las leyes de las combinaciones:

- Ley de la Conservación de la masa (Lavoisier): Si en una reacción química los átomos no cambian, sino sólo se reagrupan, no puede haber variación de masa.

- Ley de la Composición definida o constante (Proust): En la figura 18 se muestra un ejemplo de la Composición definida o constante enunciada por Proust. En este caso se establece que la composición de la sal común, cloruro de sodio, es de 1 a 1.

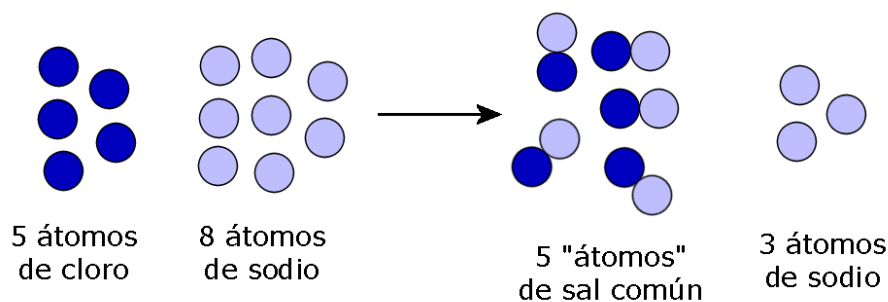


Figura 18. Representación de la Ley de la Composición definida o constante para la formación de sal común (cloruro de sodio).

- Ley de las proporciones múltiples: En la figura 19 se muestra un esquema en el que se muestra la ley de las proporciones múltiples para la formación de dos óxidos de cobre, en relación 1 a 1 y 1 a 2.

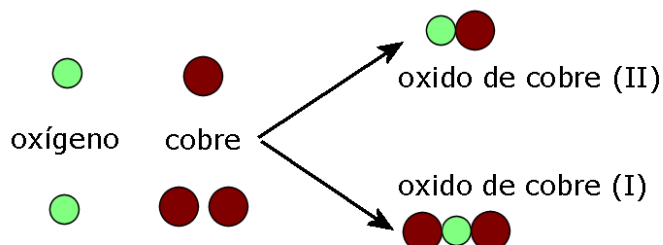


Figura 19. Representación de la Ley de las proporciones múltiples para la formación de dos óxidos de cobre.

9.3. Ley de los volúmenes de combinación

Las leyes vistas hasta ahora son ponderales (referidas a masas). La ley de los volúmenes de combinación, fue descubierta empíricamente por Gay-Lussac, estudiando los volúmenes de los gases reaccionantes y resultantes en diversas reacciones químicas.

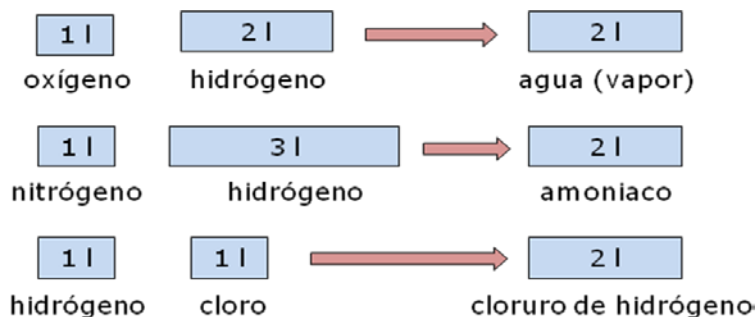


Figura 20. Ejemplos de las Ley de los volúmenes de combinación en tres reacciones químicas.

El enunciado de esta ley sería: "Los volúmenes, medidos en las mismas condiciones, de las sustancias gaseosas que intervienen en una reacción química están en una relación de números enteros y sencillos".

Gay-Lussac observó que el volumen de la combinación gaseosa resultante era inferior o a lo más igual a la suma de los volúmenes de las sustancias gaseosas que se combinan.

9.4. Hipótesis de Avogadro

Avogadro trató de explicar los resultados obtenidos por Gay-Lussac dentro de la teoría atómica. Para ello sugirió como hipótesis que dos porciones de igual volumen (en idénticas condiciones) de un mismo gas o gases diferentes contienen igual número de moléculas. Así, enunció:

"A igualdad de presión y temperatura, en volúmenes iguales de todos los gases existe el mismo número de partículas".

Por esto, las relaciones volumétricas de los gases que intervienen en una reacción son sencillas, tal y como se establecía en la ley de Gay-Lussac.

La hipótesis de Avogadro lleva consigo que las moléculas de los gases elementales son diatómicas (H_2 , Cl_2 , O_2 , etc.) y no monoatómicas (H, Cl, O, etc.) como la teoría atómica, con Dalton al frente, había creído hasta entonces. Dalton suponía que la molécula del agua era HO y no consideraba una posible relación entre volumen y número de partículas; es decir, la teoría atómica de Dalton no explicaba la ley de Gay-Lussac.

9.5. Medida de la cantidad de materia: Mol

Debido al pequeño tamaño y masa de las partículas (átomos, moléculas, etc.) que forman la materia es conveniente manejar en los cálculos grupos de gran cantidad de partículas. En química se trabaja siempre en moles.

El **Mol** es una unidad de cantidad de materia. Es el número de Avogadro de partículas que formen la materia de la que se hable. El número de Avogadro (N) es $6,023 \cdot 10^{23}$ y es el número de partículas que existen en 22,4 litros de un gas en condiciones normales (es decir, $0^\circ C$ y 1 atm de presión). Las partículas pueden ser átomos, moléculas, iones, etc.

Por tanto, un mol es $6,023 \cdot 10^{23}$ partículas de materia.

9.6. Medida de la masa en Química

En los postulados de Dalton, queda establecido que cada átomo tiene un peso o masa propio diferente del de cualquier átomo de otra clase. Así, definimos los siguientes conceptos:

La **Masa atómica relativa de un elemento o peso atómico** es el cociente entre la masa promedio de los átomos del elemento y la doceava parte de la masa de un átomo de Carbono 12. (Masa promedio de los isótopos, tomando como patrón la

doceava parte de la masa del átomo del isótopo 12 del carbono). Es una magnitud relativa por lo que carece de unidades.

La **Masa Molecular** es la suma de las masas atómicas de los átomos que constituyen una molécula.

Puesto que en química no se habla de átomos o moléculas de una en una sino que se habla de paquetes de N partículas, un mol tiene una masa distinta para cada tipo de sustancia. Así 18 g pesa un mol de agua (es decir, $6.023 \cdot 10^{23}$ moléculas de agua pesan 18 g), 342.3 g un mol de sacarosa (N moléculas), 65.3 g de zinc (N átomos).

Estas distintas masas tienen en común el poseer el mismo número de partículas, ya sean moléculas, como el caso del agua o la sacarosa (compuestos), o átomos como en el caso del zinc (elemento). Y este número es $6,023 \cdot 10^{23}$, esto es, el número de Avogadro, N.

A partir de los conocimientos expuestos en este capítulo se pueden hacer cálculos de cantidades de materia en masa, volumen o moles en los procesos químicos.

9.7. Ecuaciones químicas

Para expresar un cambio químico se utilizan ecuaciones químicas expresando cada sustancia mediante su fórmula y el conjunto de datos debe estar ajustado en cuanto a número de átomos o de moles, ya que es la misma proporción. Por ejemplo, algunas reacciones típicas serían:

- Una reacción ácido-base: $\text{NaOH} + \text{HCl} \rightarrow \text{NaCl} + \text{H}_2\text{O}$
- Una reacción de oxidación: $2 \text{Cu} + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{CuO}$
- Una reacción de combustión (oxidación): $\text{C}_4 \text{H}_{10} + 9 \text{O}_2 \rightarrow 4 \text{CO}_2 + 5 \text{H}_2\text{O} + \text{E}$
- Una reacción de reducción: $4 \text{CuO} + \text{E} \rightarrow 2 \text{Cu}_2\text{O} + \text{O}_2$

A veces, si es de interés, se especifica si la reacción es exoenergética o endoenergética, es decir, si libera calor o necesita calor para que ocurra.