

QUIMIOFILIA®

Divulgación de la Ciencia Química

EQUILIBRIO QUÍMICO

Fotoquímica
Estereoquímica
Electroquímica

No. 13.-02-2020.-\$50.0 MXN



Geber & Lav
Los orígenes de Lav

BPL

MARZO
20 Y 21

**BUENAS PRÁCTICAS
DE LABORATORIO**

Instalaciones
adecuadas

Equipo adecuado
y calibrado

Personal
Calificado



servicioaclientes@grupoidaaii.com
josue.martinez@grupoidaaii.com



2721591886
2721591815



Grupo IDAII

CDMX

Hotel Stanza

www.grupoidaaii.com



GUADALAJARA
28 DE MARZO

BPL'S

ENSAYOS FISICO QUIMICOS



BUENAS PRÁCTICAS DE LABORATORIO PARA
ENSAYOS FISICO QUÍMICOS



272 159 1886
272 159 1815

 **Grupo
IDAII**



GRUPO IDAII

EDITORIAL

Cuando inicié Quimiofilia, hace ya 3 años, inmediatamente recibí el apoyo de todos mis amigos químicos y no químicos, y al decir *todos*, me refiero a todos. Cada uno contribuyó con un consejo, con su aprobación o con un codiciado *like* a la página en Facebook. Mucha gente cree que Quimiofilia es una sola persona: yo; muchos me dicen así: *Quimiofilia*, *Doctor Quimiofilia*, *Profesor Quimiofilia*, etcétera, sin embargo no es así: Quimiofilia es mucha gente y el corazón de este proyecto lo conforman los colaboradores internos que desinteresadamente brindan su tiempo, espacio y valiosa capacidad para contactar gente o revisar y proponer contenidos.

En esta ocasión el número 13 de Quimiofilia fue redactado por el Comité Interno. Ya en otras ocasiones todos hemos escrito en algún número, pero esta vez todos hemos coincidido en uno mismo y el resultado es por demás excitante –*will blow your mind*, como dicen los que hablan inglés, o *te flipará*, como dicen en la Madre Patria–. Y es que no es para menos. En las próximas páginas van a poder corroborar ustedes la calidad de divulgadores que conforman a este equipo.

Me he sentido honrado al ver cómo cada uno confía su trabajo a esta revista teniendo la capacidad de publicar en cualquier otra o incluso tener una propia. Si bien todas las ideas y conceptos que mostramos en esta entrega son de uso general en libros y aulas de clases, la forma en la que mis compañeros las han expuesto rebosa de originalidad y creatividad, tanto que cada texto es un ejemplo de cómo todo el conocimiento se puede compartir de forma sencilla y efectiva.

No puedo dejar de mencionar a las personas que sin ser del Comité Interno –de forma oficial–, nos apoyan número a número. Me refiero a Katy Pérez, Carla Cervantes, Margarita Bernal, Edna Zúñiga, Chucho Rivera y Gabriel Navarrete, quienes desinteresadamente canalizan su energía, capacidad y esfuerzo para que este proyecto siga creciendo y la información pueda llegar a todos ustedes de forma limpia.

La razón por la que elegimos 20 Teorías que Edificaron a la Química es porque en esta ocasión nos queremos acercar a las personas que no entienden –todavía– química, ya sea porque aún no han empezado o porque nadie había sido capaz de transmitirles los conceptos de forma entendible. En esta ocasión estamos intentando hacerlo, esperamos lograrlo y motivarlos a seguir aprendiendo.



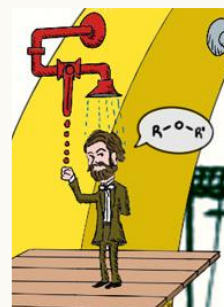
EN PORTADA

Muchos de ustedes se deben estar preguntando la identidad de los personajes que aparecen en nuestra portada y porqué los representamos así. Bueno, el contexto de cada uno de ellos es complejo y a la vez fascinante, aquí les dejamos la identificación y una breve explicación de cada uno



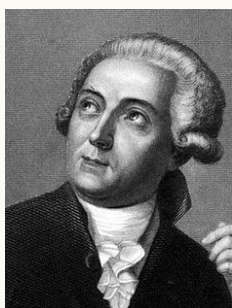
ELIAS COREY (1928-)

El Autor de la Retrosíntesis, método para racionalizar la obtención de cualquier molécula, lo que le dio un vuelco de 180 grados a la síntesis moderna y le valió el Premio Nobel de química en 1990. Corey se ha visto envuelto en algunas controversias con otros científicos.



ALEXANDER W. WILLIAMSON (1824-1904)

Descubrió el mejor método de síntesis para obtención de éteres y es uno de los padres del concepto de equilibrio químico. A pesar de no tener el brazo izquierdo y haber sufrido un accidente casi fatal, Williamson fue uno de los pocos discípulos de Liebig en doctorarse.



ANTOINE LAVOISIER (1743-1794)

Descubridor del oxígeno y promulgador de la Ley de Conservación de la Materia, es considerado el Padre de la Química Moderna.



MARIE CURIE (1867-1934)

Estudiosa del fenómeno de reactividad. Compartió el Premio Nobel de Física en 1904 y Ganó el Premio Nobel de Química en 1911.



JOSEPH LE BEL (1847-1930)

Uno de los descubridores del carbono tetraédrico y precursor de la estereoquímica.

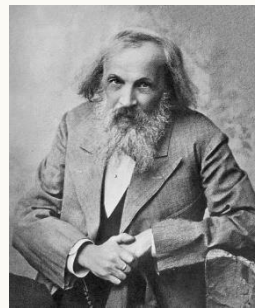


LOUIS PASTEUR (1822-1895)

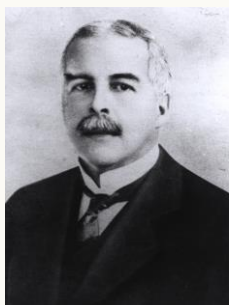
Químico y microbiólogo, fue la primera persona en llevar a cabo una resolución mecánica de cristales enantimorfos de ácido tartárico.



YĀBIR IBN HAYYAN “GEBER” (721-813)
 Introdujo el trabajo sistemático y experimental a la entonces alquimia. Muchos lo consideran el padre de la química.



DMITRI IVÁNOVICH MENDELÉYEV (1834-1907)
 Organizó a los elementos en una Tabla Periódica, lo cual elevó a la Química a la categoría de ciencia predictiva.



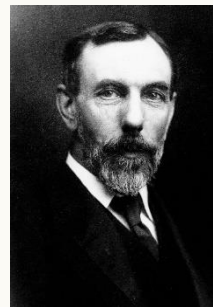
GILBERT NEWTON LEWIS (1875-1946)
 Uno de los químicos más influyentes de la historia. Prácticamente organizó todo el conocimiento de su tiempo. Como persona, muchos cuestionamientos morales y autoreproches le atormentaron.



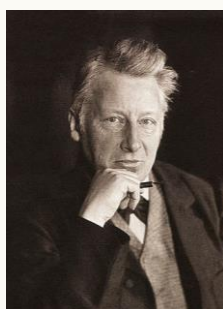
FRIEDRICH WÖHLER (1800-1882)
 Al sintetizar urea derrumbó a la Teoría Vitalista y dio lugar a la distinción entre química orgánica e inorgánica. Fue el primero en diferenciar una molécula de un átomo. Se dice que tenía un urinal en su laboratorio para aislar urea de la orina.



HERMANN EMIL FISCHER (1852-1919)
 Dominó e influyó prácticamente todas las áreas de la química de su tiempo. Se le considera el Padre de la Bioquímica Moderna. Premio Nobel de Química en 1902.



WILLIAM RAMSAY (1852-1916)
 El descubridor de los gases nobles, introdujo rigurosas técnicas experimentales a la química, lo que le valió el Premio Nobel de Química en 1904.



JACOBUS HENRICUS VAN 'T HOFF (1852-1911)
 A los 22 años de edad descubrió la geometría tetraédrica del carbono. Autor de teorías de disolución y cinética química ganó el primer Premio Nobel en 1901.

CONTENIDO

9 – TEORÍA DEL MODELO ATÓMICO

14 – LEY PERIÓDICA DE LOS ELEMENTOS QUÍMICOS
Una Historia

Entrevista

17 – LA QUÍMICA ACABÓ
José Antonio Chamizo

28 – TEORÍAS QUE EXPLICAN EL ENLACE
QUÍMICO EN MOLÉCULAS ORGÁNICAS

33 – ENLACE DE COORDINACIÓN

38 – LÍNEA DE TIEMPO DE LA TEORÍA ÁCIDO-BASE

41 – POLVITOS VEMOS, CANTIDADES NO SABEMOS
Sobre El Concepto De Mol Y El Factor Unitario

44 – SÍNTESIS ORGÁNICA

50 – ESTEREOQUÍMICA

CONTENIDO

53 – CATÁLISIS

Y Cómo Quitarle la Corcholata a una Botella de Refresco

58 – LA UTILIDAD DE LA ELECTRONEGATIVIDAD

61 – EQUILIBRIO QUÍMICO

67 – ELECTROQUÍMICA

70 – FOTOQUÍMICA

73 – RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

77 – SOLUCIONES

Historieta

81 – GEBER & LAV: EL ORIGEN DE LAV

AÑO 3, NÚM. 13, ENERO – FEBRERO 2020.

"QUIMIOFILIA" es una revista de publicación electrónica, mediante la cual se promueve la divulgación de la ciencia química, cuyo editor responsable es José Domingo Rivera Ramírez. Reserva de Derechos al Uso Exclusivo del Instituto Nacional de Derechos de Autor: 04-2019-062013201300-203. ISSN: 2683-2364. El logotipo y el nombre con sus variantes, tonalidades, tamaños, formatos y versiones son derechos de Propiedad Intelectual (REGISTRO DE MARCA: 2052060) cuya titularidad le corresponden de manera exclusiva a José Domingo Rivera Ramírez. La difusión de este documento es en formato digital a través de descarga en la página web WWW.QUIMIOFILIA.COM. La comercialización del formato digital por otro medio diverso al indicado con anterioridad o su impresión, sin la autorización por escrito de José Domingo Rivera Ramírez y de los autores de los artículos publicados en el mismo, constituye una violación a las leyes sobre Derechos de Autor y Propiedad Industrial. El presente documento tiene como fin divulgar información al público en general, así como a especialistas, investigadores, estudiantes y profesionistas. El contenido de los artículos publicados y las opiniones expresadas por los autores son responsabilidad de cada uno de ellos y no reflejan necesariamente la postura del editor de la publicación o la opinión de José Domingo Rivera Ramírez. El contenido, promociones y material gráfico que se inserta en los espacios publicitarios son responsabilidad de los anunciantes, por lo que José Domingo Rivera Ramírez no se hace responsable por el tipo de publicidad ni por las ofertas realizadas por los mismos. En la revista QUIMIOFILIA no se promueve, incita, insinúa, sugiere o invita a que la información en ella presentada sea utilizada sin la asesoría de un experto y/o para fines que contravengan las leyes y/o las buenas costumbres de cada país en el que se tenga acceso a la misma.

EQUIPO QUIMIOFILIA

DIRECCIÓN Y EDICIÓN

José Domingo Rivera
Universidad de Guadalajara

COORDINACIÓN QUÍMICA

Eder I. Martínez
Doctor en Ciencias
Químico-biológicas. Profesor
Investigador de la Universidad
Autónoma de Coahuila.
edermartinez@uadec.edu.mx

Hugo Saucedo
Maestro en Ciencias Químicas.
Especialista en síntesis organo-
metálica. Profesor de licenciatura.
Universidad de Guadalajara
azpeitiasaucedo@yahoo.com.mx

Daniel Olea
Doctorante en ciencias
sustentables por el IPN
Investigador
vash09_96@hotmail.com

Fabiola N. de la Cruz
Doctora en Química. Profesora
Investigadora de la Universidad
Autónoma de Coahuila.
fcruz@uadec.edu.mx

Carla Cervantes
Doctora en Ciencias en
Biología Celular por el
CINVESTAV, México
cervantespbt@yahoo.com

COORDINACIÓN DE ENTREVISTAS

Cristina González
Doctora en Química Teórica.
Investigadora en el departa-
mento de fisicoquímica de la
Université de Genève.
crisbeth46@gmail.com

Evin Granados
Doctor en Química Orgánica
Gerente de Investigación y
Desarrollo Sinbiotik, SA de CV.
evinhazael@yahoo.com

Luz Díaz
Estudiante del 10º semestre de
QFB, Universidad de
Guadalajara.
luzcardona3219@hotmail.com

CARICATURA E ILUSTRACIÓN

DrawOp
José Oivan
Facebook / DrawOp

Angel Contreras
Gerente de Investigación y
Desarrollo Apotex Pharmachem
Inc.
ancoga2000@gmail.com

Thalía Oseguera
Maestra en Ciencias en
Biotecnología. Especialista en
diagnóstico molecular.
thalia.tom@gmail.com

Edna B. Zúñiga
Química y Maestra en Docencia.
Profesora de la FES,
Universidad Nacional Autónoma
de México
zladyz@hotmail.com

Astrid Guadalupe Mora
Licenciada en Química (ULA).
Analista de Control de Calidad
(Valca).
Mérida, Venezuela.
astridgmc@gmail.com

DISEÑO WEB

Mi Empresa Online
<http://www.miempresaonline.com.mx/>

COLABORADORES EN ESTE NÚMERO

ARTÍCULOS

Catalina M. Pérez Berumen

Profesora investigadora de la Universidad Autónoma de Coahuila, México
catalinaperez@uadec.edu.mx

Liliana Cantú Sifuentes

Profesora de la Universidad Autónoma de Coahuila, México
lcantu@uadec.edu.mx

Gonzalo Ramírez García

Investigador en el Centro de Investigación en Química Aplicada
Coahuila, México.
gonzalo.ramirez@ciqa.edu.mx

Antonio Ruiz Martínez

Estudiante de la licenciatura en Químico Farmacéutico Biólogo
Universidad de Guadalajara.

Bernardo Gudiño

Profesor investigador
Universidad de Guadalajara.
bernardo.gudino@academicos.udg.mx

Por
Daniel Olea

TEORIA DEL MODELO ATÓMICO

Los fenómenos eléctricos fueron los que dieron lugar a que se pensara en la posibilidad de un átomo divisible. La corriente eléctrica se debe a un movimiento de electrones a través de un conductor.¹

¿Qué ocurriría si dividiéramos un trozo de materia muchas veces? ¿Llegaríamos hasta una parte indivisible o podríamos seguir dividiendo sin parar?

Los filósofos de la antigua Grecia discutieron bastante sobre este tema. El problema es que estos filósofos no utilizaban ni la medición ni la experimentación para llegar a sus conclusiones, por tanto, no seguían las fases del método científico. De esta forma, se establecieron dos teorías: la atomista y la continuista, que se basaban, respectivamente, en la existencia de partes indivisibles de la materia o en que siempre se podía seguir dividiendo infinitamente a ésta.²

En el siglo V a.C., Leucipo pensaba que sólo había un tipo de materia. Sostenía, además, que si dividíamos la materia en partes cada vez más pequeñas acabaríamos encontrando una porción que no se podría seguir dividiendo. Un discípulo suyo, Demócrito, bautizó a estas partes indivisibles de materia con el nombre de *átomos*, término que en griego significa "que no se puede dividir". Los atomistas pensaban que:

- Todo está hecho de átomos y que si dividimos una sustancia muchas veces, llegaremos a ellos.
- Las propiedades de la materia varían según como se agrupen los átomos.
- Los átomos no pueden verse porque son muy pequeños.

Aristóteles rechazó la teoría atomista y estableció que la materia estaba formada por cuatro elementos: tierra, agua, aire y fuego, esta teoría se llamó continuista. Gracias al prestigio que tenía Aristóteles, se mantuvo vigente en el pensamiento de la humanidad durante más de 2000 años. Los continuistas pensaban que:

- Los átomos no existen. No hay límite para dividir a la materia.
- Si las partículas, llamadas átomos, no pueden verse, es porque no existen.
- Todas las sustancias están formadas por las combinaciones de los 4 elementos básicos: agua, aire, tierra y fuego.

El fenómeno de la electricidad llamó la atención de las personas desde hace mucho tiempo. Hacia el año 600 a. C., el filósofo griego Tales de Mileto frotó una resina de ámbar con piel de gato y consiguió atraer con ella unos trozos de pluma. Ámbar, en griego, se denomina *elektron*, de ahí que ese fenómeno se conozca con el nombre de electricidad.²

A lo largo de la historia de la electricidad se han ideado distintos aparatos para saber si un cuerpo está electrizado o no. Algunos de estos aparatos permiten comprobar que los cuerpos que tienen carga del mismo signo se repelen y si tienen cargas de distinto signo, se atraen.

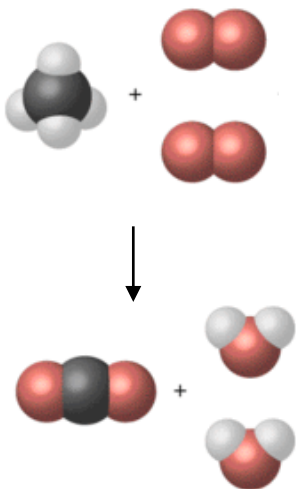


Figura 1. En el modelo atómico de Dalton los átomos eran esferas y un tipo de átomo se diferenciaba de otro por su tamaño.

MODELO ATÓMICO DE DALTON

Estudiando las leyes de los gases, el inglés John Dalton (1766-1844) propuso la primera teoría atómica. Según él, el átomo era la parte más pequeña de la materia, la que ya no podía seguir dividiéndose.³

La forma de representar el átomo en este modelo era como una esfera sólida, parecida a una bola de billar. De hecho, Dalton y los que apoyaron su teoría, tallaron bolas en madera de diferentes tamaños, simulando átomos de diferentes elementos (Figura 1). Para la época, se desconocía por completo la existencia del electrón y del protón, por lo que el modelo de Dalton persistió por casi un siglo.

De las ideas de Dalton se pueden rescatar los siguientes postulados:

1. La materia está formada por minúsculas partículas indivisibles llamadas átomos
2. Los átomos de un mismo elemento químico son todos iguales entre sí y diferentes a los átomos de los demás elementos.
3. Los compuestos se forman al unirse los átomos de dos o más elementos en proporciones constantes y sencillas.
4. En las reacciones químicas los átomos se intercambian; pero, ninguno de ellos desaparece ni se transforma en otro átomo.

MODELO ATÓMICO DE THOMSON

En ese tiempo el avance de los descubrimientos aún era lento y tuvo que pasar casi un siglo (para nuestros estándares actuales de avance es mucho tiempo) para que se descubriera de qué están hechos los átomos. En 1897, el físico inglés Joseph John Thomson (1865-1940), trabajando con tubos al vacío, fue capaz de mostrar la deflexión de los rayos catódicos en un campo eléctrico. Para aquella época, se aceptó que los rayos catódicos eran corrientes de partículas cargadas negativamente (Figura 2). Las ideas de Thomson se resumen así:

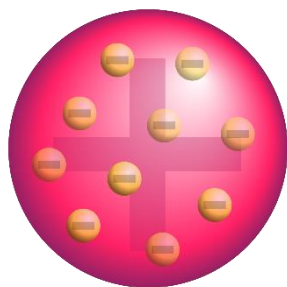


Figura 2. En el modelo atómico de Thomson, o del budín de pasas se pensaba que el electrón era una masa que estaba incrustada con electrones.

- Los protones y electrones son partículas con cargas iguales pero de signo opuesto.
- En un átomo neutro la carga es cero, ya que la cantidad de electrones negativos es igual a la cantidad de protones positivos.
- Un átomo tiene la forma de una esfera con un radio de 0,00000001 cm, donde protones y electrones están distribuidos al azar.
- La masa de los electrones no se toma en cuenta debido a su insignificancia, por lo que la masa del átomo es igual a la masa de los protones.
- Thomson se imaginó el átomo como pudín de pasas en el cual la mayor parte de la masa del átomo correspondería a una carga positiva, que ocuparía la mayor parte del volumen atómico, es decir el pan, en el cual estaban incrustados los electrones como unas pasas.

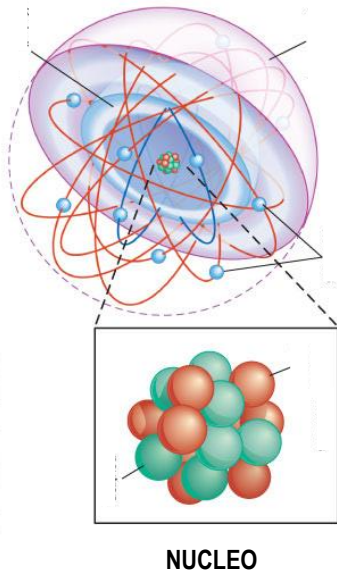


Figura 3. Modelo atómico planetario de Perrin.

MODELO ATÓMICO DE PERRIN

El físico francés Jean Perrin (1870-1942) publicó en 1901 lo que sería el primer modelo basado en el sistema planetario. La radiactividad podía explicarse como la disminución de la atracción eléctrica del sol atómico por los electrones más externos (los Neptunos del sistema, como los llamaba Perrin). Perrin sugirió que los átomos estaban constituidos por soles positivos rodeados de pequeños planetas negativos, tal como el sistema solar (Figura 3). Este modelo no pasó de ser un simple bosquejo y Perrin no mostró interés en continuar su estudio. De hecho, Perrin ganó el premio Nobel de Física en 1926 por sus trabajos en el movimiento de partículas en fluidos.¹

MODELO ATÓMICO DE NAGAOKA

El físico japonés Hantaro Nagaoka (1865-1950) propuso en 1903 un modelo atómico con electrones orbitando en círculos alrededor de una gran masa central positiva. Sus investigaciones fueron publicadas en 1904.⁴ Según Nagaoka, el sistema de partículas era similar al sistema de Saturno. El modelo atómico de Nagaoka es conocido como el modelo saturnino (Figura 4). Éste consistía en:⁵

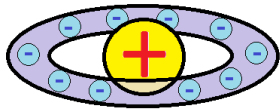


Figura 4. Modelo Atómico Saturnino de Nagaoka.

- Un gran número de partículas de igual masa dispuestas en círculos que se repelen entre si.
- Una masa central cargada positivamente que atrae a las otras partículas cargadas negativamente, con la consecuente formación de anillos.

MODELO ATÓMICO DE RUTHERFORD

Le correspondió a un brillante estudiante de J.J. Thomson, el físico neozelandés Ernest Rutherford (1871-1937), resolver el problema de la estructura del átomo en 1911, en Inglaterra. Aprovechándose del descubrimiento de la radiactividad en 1896, Rutherford y sus estudiantes, Hans Geiger y Ernest Marsden, usaron partículas radiactivas alfa de gran velocidad y energía, bombardearon elementos químicos y calcularon el ángulo de desviación (dispersión) de las partículas. Si el átomo era como el modelo propuesto por Thomson, las partículas alfa atravesarían el elemento y la desviación sería mínima. En cambio, observaron que algunas partículas rebotaban. Esto sólo podría explicarse si el átomo tuviera un núcleo muy pequeño y condensado.⁵ De estos resultados, Rutherford extrajo los siguientes postulados:

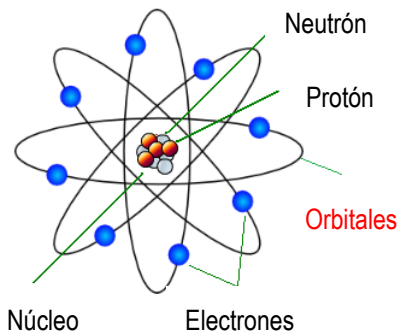


Figura 5. Modelo atómico de Rutherford.

- Existe una pequeña región densa cargada positivamente, llamada núcleo.
- La masa del átomo es aproximadamente igual a la masa de los protones y electrones.
- Los protones dentro del núcleo están concentrados en el centro del átomo, y los electrones distribuidos al azar alrededor de estos.

Rutherford propuso entonces que el átomo era como el sistema solar donde el núcleo era el Sol y los electrones eran los planetas que orbitaban a su alrededor.

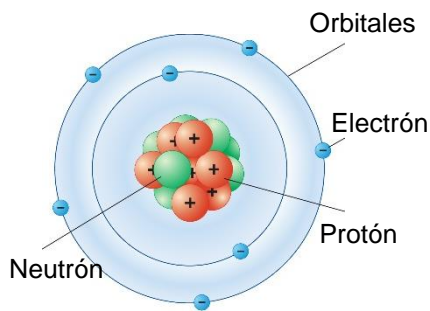


Figura 6. Modelo atómico de Bohr.

MODELO ATÓMICO DE BOHR

El modelo planetario del átomo tenía problemas: si los electrones orbitaban libremente alrededor del núcleo, perderían energía y colapsarían en algún momento dentro del núcleo. Niels Bohr (1885-1962) fue a la Universidad de Manchester en Inglaterra a estudiar con Rutherford. Este joven físico danés ideó en 1913 el modelo atómico que destronaría al modelo propuesto pocos años antes por su profesor.

Bohr se valió de las ideas de Max Planck y Albert Einstein y postuló que los electrones podían tener una cierta cantidad de energía. Arregló los electrones en órbitas circulares con una cantidad específica de energía (Figura 6). También explicó que si un electrón salta de un orbital de alta energía a uno de menor, esto produciría un fotón, con lo cual quedaba resuelto también el fenómeno de los espectros de absorción de los elementos.³ Los postulados de Niels Bohr se resumen de la siguiente forma:

- Los electrones en un átomo se mueven de forma estable a una cierta distancia del núcleo con una energía definida. Esto es lo que se llama el estado estacionario.
- Los electrones en cada estado estacionario siguen una ruta u órbita circular. Cada órbita recibe el nombre de "nivel energético" o "capa".
- Cuando el electrón está en el estado estacionario, no produce luz (fotón). Sin embargo, cuando baja de nivel energético, emite un fotón.
- Los niveles estacionarios, o capas, se denominan con las letras K, L, M, N, y así sucesivamente.

Los postulados de Bohr llevaron a representar el átomo como las capas o anillos de una cebolla (Figura 5). Sin embargo, el modelo de Bohr no sirvió para explicar átomos con más de un electrón.³

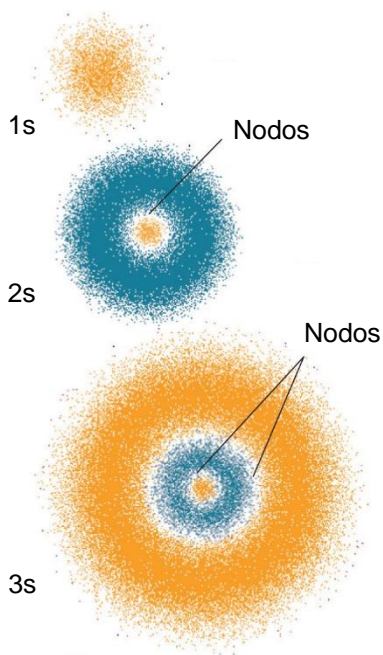


Figura 7. Modelo atómico mecánico cuántico.

MODELO MECÁNICO CUÁNTICO DEL ÁTOMO

El modelo mecánico cuántico del átomo es el modelo aceptado en la actualidad. Los tres físicos que contribuyeron al conocimiento del átomo moderno fueron Werner Heisenberg (1901-1976), Louis de Broglie (1892-1987) y Erwin Schrödinger (1887-1961). En este caso, el electrón se comporta como una onda estacionaria y ya no se habla de órbitas sino de nubes electrónicas (Figura 7). Las nubes electrónicas son espacios alrededor del núcleo donde probablemente se pueda encontrar el electrón.

Aquí cada electrón tiene una dirección específica reflejada en los 4 números cuánticos:

- Número cuántico principal: el nivel energético $n = 1$ (K), 2 (L), 3 (M), 4 (N)...
- Número cuántico secundario: la subcapa $l = s, p, d, f$.
- Número cuántico magnético: el orbital $m = x, y, z$.
- Número cuántico spin: el tipo de spin del electrón $s = +1/2, -1/2$.
- En este sentido, no hay dos electrones que tengan los mismos números cuánticos. Esto se conoce como el *Principio de Exclusión de Pauli*.

Nuestro entendimiento del átomo ha dado pasos muy grandes desde su concepción en la Antigua Grecia, sin embargo, los modelos que tenemos aún no describen en su extensión este interesante fenómeno, es decir, aún queda mucho por hacer.

BIBLIOGRAFIA

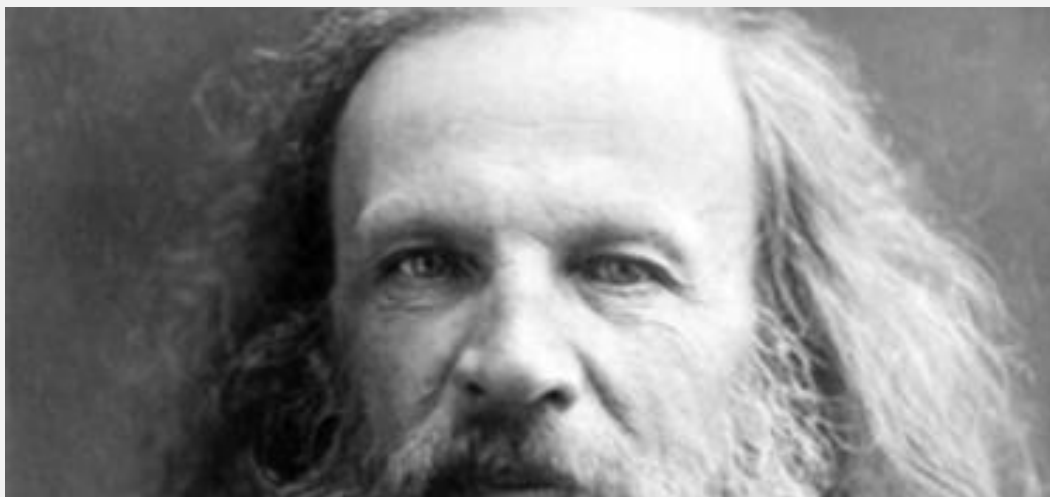
1. Eisberg, R. & Resnick, R., "Física cuántica; átomos moléculas, sólidos, núcleos y partículas", Limusa, 2014
2. Brown, E. Le May & B. E. Burnsted "Química la ciencia central", Prentice Hall, 2012
3. Casabo, I.; Gispert, Jaume, "Estructura atómica y enlace químico", Reverte S. A., 2012
4. P. A. Cox "Introduction to Quantum Theory and Atomic Structure (Oxford Chemistry Primers, 37)", Oxford University Press, 2010
5. D. Cruz, Chamizo, and A. Garritz, "estructura atómica: un enfoque químico", FEI, 2013

PARA SABER MÁS

- BENSUADE-VICENT, B.; STENGERS, I. 1997. Historia de la química. Madrid: Addison-Wesley.
- BROCK, W. H. 1998. Historia de la química. Madrid: Alianza editorial.
- BOHR, N. 1988. La teoría atómica y la descripción de la Naturaleza. Madrid: Alianza Universidad.
- CARTMELL, E. and FOWLES, G.W.A. 1979. Valencia y estructura molecular. Barcelona: Reverte.
- CATALÁN, M. A. En recuerdo del profesor. 1992. Madrid: CSIC.
- CENTELLAS, F. and BRILLAS. 1992. Fonaments d'estructura atòmica i de l'enllaç química. Barcelona: Barcanova.
- COSTA I TORRES, J.M. and LLUCH I LIPEZ J.J. 1993. Química. Estructura de la materia. Barcelona: Enciclopedia Catalana.
- CRUZ, D et al. 1987. Estructura Atómica, un enfoque químico. Mexico: Addison - Wesley.
- FRANCO, F. 1983. Elementos químicos y sus aplicaciones. Madrid - Barcelona: Index.
- GARZON RUIPEREZ, L. 1988. De Mendeleiev a los superelementos. Oviedo. Servicio de Publicaciones de la Universidad de Oviedo.
- NICOLAU, F. 1995. Els elements que componen el cosmos. Barcelona: Claret.
- SÁNCHEZ RON, J. M. 1986. Miguel Catalan; su obra y su mundo. Madrid: CSIC.

LEY PERIÓDICA DE LOS ELEMENTOS QUÍMICOS UNA HISTORIA

Por Astrid Guadalupe Mora



El año 2019 fue decretado por la UNESCO como el Año Internacional de la Tabla Periódica, para rendir homenaje al aniversario 150 de su descubrimiento. Forma parte de nuestra cotidianidad, es nuestro lenguaje, no solo la pueden utilizar los que ejercen la noble profesión de la química, es utilizada por docentes, médicos, biólogos, ingenieros, entre otros. Físicamente la podemos hallar por doquier, en los salones de clases, laboratorios, libros, folletos, tarjetas y como aplicación en los teléfonos inteligentes. También forma parte de la cultura pop apareciendo en series de televisión y películas. Pero detrás de esta herramienta de trabajo del químico, se esconde una historia que se encuentra muy ligada al desarrollo de la química como ciencia. En este artículo se detallarán los hechos históricos que llevaron a concebir a la tabla periódica de los elementos químicos como la conocemos hoy en día.

En un principio, el descubrimiento de los distintos elementos químicos va de la mano con la historia del desarrollo tecnológico de las civilizaciones. Desde tiempos muy remotos se conocía el hierro, el cobre, la plata, el oro, el mercurio, el estaño, el antimonio, el plomo, el azufre y el carbono. Se utilizaba –y se siguen usando hoy en día– en la fabricación de armas, utensilios de uso diario, acuñado de monedas, joyería, entre otros. Más adelante, con el aporte de distintas mentes brillantes, se conoció el arsénico (1250 por San Alberto Magno) y el fósforo (1669 por Hennig Brand). Esta pequeña lista de elementos químicos

llegó al siglo XVIII, en donde se añadió a la misma nuevos elementos como el cobalto, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno, vanadio, entre otros. Al llegar al siglo XIX la comunidad científica y en especial su nueva clase de representantes, los químicos, se comenzaron a formular las siguientes preguntas ¿Qué relación tienen entre sí los elementos? ¿Cómo podemos ordenarlos? ¿Podrían existir elementos que todavía están sin descubrir?

Un primer intento de organizar los elementos químicos de forma sistemática fue realizado en el año 1817 por el químico alemán Johann

W. Döbereiner. ¿Cuál fue el criterio que empleó para dicha organización? La relación existente entre el peso equivalente del óxido de estroncio que es igual a la media aritmética de los pesos equivalentes de los óxidos de calcio y bario. Posteriormente, al disponer de pesos atómicos, obtenidos de manera más precisa, se pudo generalizar ese descubrimiento formando varias series que las denominó triadas, esto se ilustrará con los siguientes ejemplos (ecuaciones 1, 2 y 3).

$$Br = \frac{Cl + I}{2} \quad (1)$$

$$Na = \frac{Li + K}{2} \quad (2)$$

$$Se = \frac{S + Te}{2} \quad (3)$$

Cabe destacar que los elementos que conforman la triada presentan propiedades químicas similares, además de tener pesos equivalentes promedio, esto se observa en las ecuaciones mostradas anteriormente. Es de resaltar que el Bromo tiene propiedades similares con el Cloro y el Yodo; esa misma observación era válida para los casos del Sodio y el Selenio. Es rescatable decir que la Regla de las Triadas fue quizá la primera teoría predictiva de la química y colocó a ésta en un lugar distintivo ya que por la época no todos la consideraban una ciencia verdadera, sin embargo, debido a los escasos datos con los que se contaba, este sistema no fue bien recibido por los químicos de ese tiempo.¹

Para 1857 Hinrichs había organizado los elementos químicos en una gráfica formada a base de líneas radiales. Los elementos que son químicamente similares, estaban dispuestos en radios distintos, entre ellos estaban los metales kaloideos (alcalinos) y los elementos cloroideos (halógenos), otros elementos eran ubicados sobre cuatro circunferencias incompletas de tal manera que formaban sucesiones (Figura 1).²

Otro modo de construcción gráfica para organizar los elementos químicos, fue propuesto por Chancourtois en el año 1862,

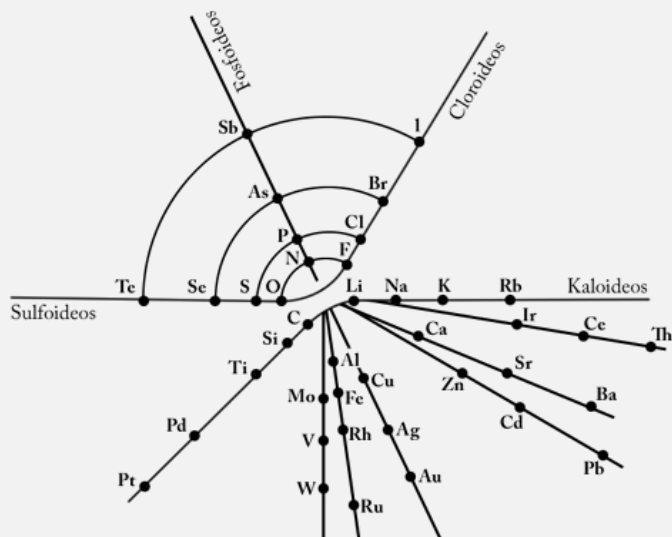


Figura 1. Gráfica de Hinrichs.

tiene la particularidad de demostrar la periodicidad y los pesos atómicos de cada uno de los elementos, la representación tenía forma de hélice, en el eje vertical se representan los pesos atómicos y en las generatrices del cilindro se sitúan los elementos en función de sus propiedades químicas, esta disposición se denominó tornillo telúrico. Esta forma de clasificación no fue exitosa, debido a que incluía cuerpos compuestos y la compleja representación gráfica (Figura 2).

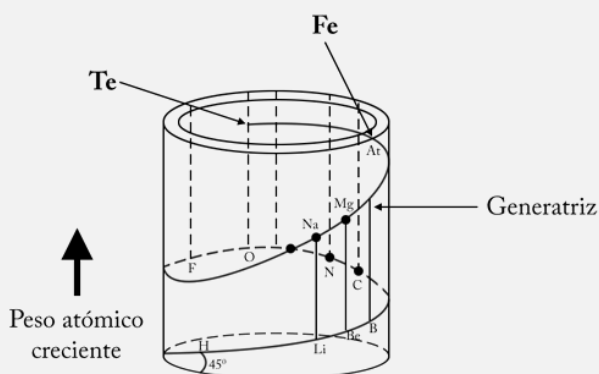


Figura 2. Tornillo Telúrico de Chancourtois

Más adelante, en 1865, Newlands observó el problema desde otra perspectiva, dispuso los elementos de forma creciente, usando los pesos atómicos:

H, Li, Be, B, C, N, O
 F, Na, Mg, Al, Si, P, S
 Cl, K, Ca, Cr, Ti, Mn, Fe

Partiendo de esta observación, Newlands pudo notar que el octavo elemento tenía similitud con el primero, el noveno con el segundo y así sucesivamente, esto se denominó como la Ley de las Octavas de Newlands. Esta teoría aunque era atractiva, no fue aceptada debido a que no incluía los elementos de descubrimiento reciente y algunos elementos no podían ajustarse al esquema de clasificación, a modo de ejemplo, el cromo lo ubicaba debajo del aluminio y el manganeso.³

Continuando con el recorrido de la línea temporal, exactamente en el año 1869, en la Rusia Imperial, un ingenioso químico llamado Dimitri Mendeleiev (el científico alemán Lothar Mayer realizó sus estudios de forma independiente) utilizó el planteamiento de Newlands, pero realizó modificaciones importantes:

1. El planteamiento fundamental de la ley periódica establece que las propiedades de los cuerpos simples y compuestos dependen de una función periódica de los pesos atómicos de los elementos por la sola razón de que estas mismas propiedades son las de los elementos que se derivan de dichos cuerpos.
2. La ilustración empleada fue una representación horizontal, donde se pudiera ordenar los elementos a partir de sus números atómicos crecientes, los cuales coincidían con la sucesión de las 8 formas de óxidos.
3. Si algún elemento no podía organizarse según su peso atómico, se dejaba un espacio para un nuevo elemento, por ejemplo, al no existir un elemento debajo del Silicio, el espacio quedaba disponible para un elemento que estaba sin descubrir, por lo tanto se le dio el nombre de Ekasilicio. De esta manera pudo predecir la existencia de dos elementos más eka-aluminio, y el eka-boro. Posteriormente se descubrieron los elementos correspondientes al galio, escandio y germanio, además de describir sus propiedades de un modo preciso, por lo tanto, los científicos de la época aceptaron fácilmente este planteamiento.

El modelo planteado por Mendeleiev presentó algunas dificultades. Primero, organizar los elementos de las tierras raras, debido a que estas tenían pesos atómicos y propiedades químicas muy semejantes. Segundo, organizar los gases nobles, los cuales, para efectos de la época, sus pesos atómicos eran difíciles de determinar.

Las ideas de Mendeleiev constituyeron el punto de partida para la tabla periódica que ha llegado a nuestros días. Durante las décadas finales del siglo XIX y todo el siglo XX ha experimentado numerosos cambios a la par de los grandes descubrimientos científicos, los cuales han incluido nuevos elementos que pueden ser naturales o sintéticos y la determinación de propiedades químicas de forma más exacta, todo esto ha hecho que la tabla periódica esté organizada tal cual como la conocemos.

REFERENCIAS

1. Garzón, R. L. De Mendeleiev a los Superelementos: un estudio crítico de la ley periódica y una formulación de su estructura, Universidad de Oviedo, Servicio de Publicaciones, España, **1988**; p. 34-36.
2. Agafoshin, N. P. Ley Periódica y Sistema Periódico de los Elementos de Mendeleiev: manual para estudiantes, Editorial Reverté, España, **1977**; p. 10-18.
3. Gray, H. B.; Haight, G. P.; Principios Básicos de Química, Editorial Reverté, España, **1980**; p. 4-4.

LA QUÍMICA ACABÓ



Entrevista a

José Antonio Chamizo

El Filósofo Mexicano de la Química

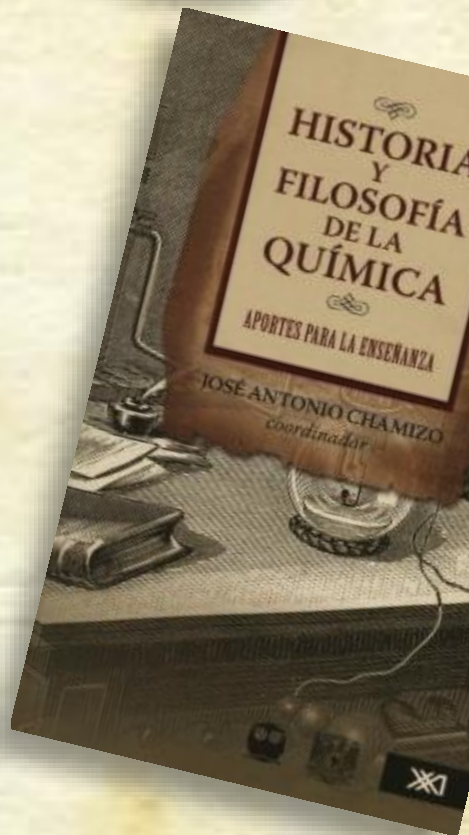
por Cristina González

Desde hace ya dos años estuvimos buscando una entrevista con José Antonio Chamizo, el famoso y respetadísimo filósofo y educador de la UNAM; es que cuando uno pretende involucrarse en la divulgación de la química, tarda poco en encontrar su nombre y trabajo por todas partes. Un aspecto sobresaliente del Doctor Chamizo es que puede inspirar a químicos y no químicos, dejando dudas, análisis y enseñanzas en sus interlocutores y lectores, cosa que pocos logran.

A reserva de lo que la misma historia diga, a partir de Chamizo podemos contar muchos avances en cuestiones de educación y didáctica de la ciencia en México. A partir de hoy, muchos de ustedes se darán cuenta de que su primer maestro de química fue él, por lo menos de una forma indirecta.

Gracias a Cristina Gonzáles por la originalidad que la caracteriza en las entrevistas que nos regala. Como siempre, disfruten esta entrevista tanto como nosotros disfrutamos haberla realizado.

Pero una cosa más, cuando la terminen vayan directamente a los trabajos del Doctor Chamizo y sumérjense en sus ideas, no se van a arrepentir.



C - Investigación, síntesis, historia, filosofía, educación y divulgación; todas de Química. Conocemos su trayectoria, pero nos interesa saber ¿cómo fue que José Antonio, el joven que estaba haciendo la maestría en química, decidió adentrarse a la historia y la filosofía de la química?

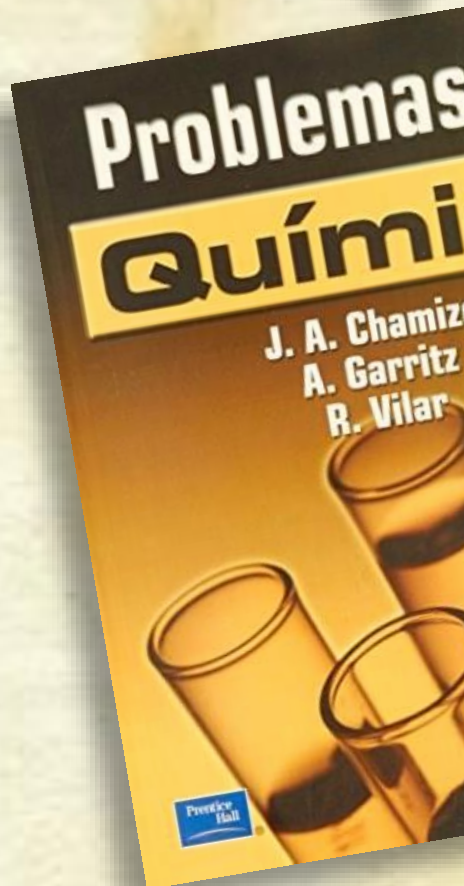
JA - Porque yo empecé, como casi todos, siendo profesor. Empecé a dar clases en prepa, muy joven, sin haber terminado la carrera, es la manera en la que un joven se puede ganar la vida. Terminé la carrera, me encantó lo que hice, empecé la maestría y me seguía encantando, pero seguía dando clases. Durante este periodo yo ya empiezo a preocuparme de manera más... cuidadosa, digamos, sobre lo que es enseñar. Pero en la UNAM era muy claro que el camino que había que seguir era hacer el doctorado. En los años 80, cuando solicito entrar a un doctorado en Inglaterra es el momento de la devaluación del peso, la crisis económica. Nos quitaron las becas, no había acceso a dólares. En el intermedio de toda esta crisis ingreso a una maestría en educación. Es en esa maestría que empiezo a estudiar algunos de los personajes que más me han interesado en la vida, que es por ejemplo **Gaston Bachelard**. Pero a la mitad del camino de la maestría me dicen: “ya te tienes que ir al doctorado”. Yo dejo la maestría que había empezado, y que me encantaba, y me voy a Inglaterra. Hago mi doctorado, y como ya tenía esta inquietud tomo clases de oyente con historiadores y filósofos de la ciencia.

C - ¿Entonces su doctorado no fue en historia y filosofía?

JA - No, química organometálica pura y dura: síntesis y estudios teóricos de química cuántica también.

Cuando termino el doctorado regreso a México con una preparación cada vez más formal, bueno no, siempre fue muy informal, pero más amplia, sobre asuntos de historia y filosofía, que eran muy diferentes a los que se enseñaban en México. Cuando llego a México hago toda la parafernalia de la carrera universitaria común. Monté un laboratorio en la UNAM, otro en la UAM, di clases en Puebla, empecé a dar clases viajando. Estuvo bien, porque la química que yo había aprendido era entonces una química nueva, unas técnicas muy interesantes. Y en el camino yo seguía leyendo y trabajando sobre esto (historia y filosofía).

También en los 80 la Secretaría de Educación Pública y COSNET nos invitaron a Andoni Garritz, con quién comparto autoría de muchos textos, y a mi, a dar un curso de profesores en todo el país. Viajamos por todo México, y viajar por todo México es TODO MÉXICO,



fue como gira artística. La SEP juntaba entre 20 y 30 profesores, generalmente en la capital de cada estado, nosotros mandábamos información, nos reuníamos con ellos la tarde del viernes, todo el sábado y la mitad del domingo y regresábamos a la Ciudad de México. Esto nos lo repartimos e invitamos algunos maestros de la UNAM para acompañarnos. Eso me cambió la vida. Para mí fue conocer México de otra manera, darme cuenta de las diferencias entre los estados, de que muchos maestros de química no eran químicos, eran **dentistas o veterinarios**.

C - ¿De qué nivel?

JA - Esto era para los bachilleratos tecnológicos de la SEP, el sistema de bachilleratos más grande del país en términos de alumnos, la mayoría de los jóvenes adolescentes de México, a menos en aquella época, accedían a uno de estos bachilleratos.

Y bueno, desde entonces Andoni y yo nos dedicamos a escribir libros de divulgación, por ejemplo en el Fondo de Cultura Económica. Fue empezar a pensar qué es lo que tienes que divulgar y de qué es lo que tienes que decir. Entonces decidimos que había que contar la historia de la química en México, que fue nuestro primer libro. No se puede estar en un país si no se entiende medianamente qué es lo que es ese país. Y la historia de la Química en México es una historia singular, como todas, pero en términos generales es muy importante. México es uno de los dos países de América latina que tiene premios Nobel en Química; el único donde se sintetizó, se aisló y se caracterizó un elemento químico; el país de América latina donde se produjo la única industria transnacional importante, que fue Syntex. El primer doctorado de todo el continente americano fue un joven de Nayarit. Y bueno, era hacer historia pero de manera amateur, sin tener formación.

Mientras tanto yo seguí investigando en química, pero llegó un momento en que había que dedicarse más a lo que hacía en educación. Fui director de una escuela, y con esa experiencia la SEP me invito a coordinar los programas y los libros de texto de primaria, todos los libros de texto gratuitos de Ciencias Naturales para la SEP. Posteriormente fui director de divulgación de ciencia de la UNAM. Entonces había que hacer divulgación. Aprendí a hacer exposiciones, a relacionar la divulgación con la educación, publicamos la revista *¿Cómo Ves?* En todas esas cosas en el fondo siempre había historia y filosofía. Voy a decirlo tontamente, si no le entendías, repetías como un perico, sin saber.

En el fondo siempre hay historia y filosofía, si no le entiendes, repites todo como perico, sin saber.

No se puede estar en un país si no se entiende medianamente qué es lo que es ese país.



C - Entonces ¿qué tanto realmente necesitamos en la vida diaria, tanto los que hacemos ciencia como los que no, de historia y filosofía? ¿estamos consumiendo suficiente?

JA - No, no necesitamos para hacer técnicamente lo que hacemos, pero sí para entender mejor el mundo. Si no, no lo entiendes; si no, no sabes por qué se toman ciertas decisiones de política. Por decir algo, tú puedes estar en contra del calentamiento global y estás de acuerdo con Trump. Pero ¿cómo vas a entender lo que pasa si no hay una clase de calentamiento global en ningún lugar? El cómo se van posicionando las personas alrededor de los problemas, eso es filosofía y es historia.

C - De acuerdo con lo que he leído de su autoría, en la enseñanza necesitamos siempre enlazar estos tres puntos: la historia, que va ligada con los desarrollos tecnológicos y nos da el contexto de lo que ocurre, y la filosofía, que es la forma de entenderlo ¿no? Sin estos tres la ciencia ...

JA - Es hueca. Sin esos tres elementos no entiendes por qué se está investigando la química que se está investigando. La química que se investiga hoy es heredera de la historia de la química, no hay escapatoria. Desde hace años participo en congresos de historia de la química y en congresos de filosofía de la química internacionales, ahí te das cuenta que lo que pasa en la disciplina proviene de donde viene.

C - Haciendo referencia a su artículo **Sobre el Método y los Modelos de la Química**. A mí me llamó mucho la atención porque, no sé si entendí bien, pero ¿quiso decir que el método científico único que aprendemos no aplica bien para la química, que la química utiliza un método propio de la química?

JA - Así es, ese método científico es una mentira, no existe. *No existe* ¿qué quiere decir?. A ver, la objetividad es una ambición. Todas las personas queremos ser objetivas en ciencia, sin duda, pero no lo somos porque todo individuo, el que quieras, se para en el mundo con la historia que tiene. Y esto del método científico no lo digo yo, hace 100 años ya los filósofos decían esto, y muchos científicos lo sabían, pero como la alternativa apela a que hay que hablar más de historia y filosofía, y apela a que los profesores tienen que estar mejor formados y apela a otras cosas. Es más fácil dar una receta. La enseñanza de las ciencias se vuelve así, dogmática.

todo individuo se para
en el mundo con la
historia que tiene

Chamizo, J. A. Filosofía de la
Química: I. Sobre el Método y
los Modelos. *Educación
Química*, 2009, 20, 6-11



El cómo se van
posicionando
las personas
alrededor de
los problemas,
eso es filosofía
y es historia.

C - En uno de los libros usted presenta el diagrama heurístico, ¿esto no es también como una receta? ¿otro tipo de receta?

JA - Heurística es una manera de investigar. Hay una manera de entender el mundo que es partir de que tú no sabes sobre algo si no haces una pregunta sobre ese algo, si no te preguntas ¿por qué el cielo es azul?, ¿por qué las hojas de los árboles son verdes y no azules? ¿por qué los árboles crecen hacia arriba y no hacia abajo? ¿por qué en las raíces no hay hojas?. Empezar en una pregunta es método socrático, de hace dos mil quinientos años. El diagrama Heurístico lo que apela es a llevar a sus últimas consecuencias una pregunta. Entonces, si tú me dices “es una receta”, yo acepto, lo es, y es una manera de hacer una investigación. O sea, en diagramas heurísticos se resume una tesis de doctorado. Claro, hay que sintetizar mucho y hay que trabajar, hay que darle vueltas y hay que saber.

C - Y con respecto a los modelos, una de las cosas que más me mueve y que me gustaría que mucha gente entendiera es que todos los conceptos que se usan son modelos, hay mucha gente que se los toma muy a pecho.

JA - Es lo que hacen los químicos todo el tiempo, pero no decimos que son modelos. El mundo es, y nosotros lo transformamos y lo modelamos. Hay muchas personas que se mueren, al menos muchos científicos, sin haber hecho esta relación.

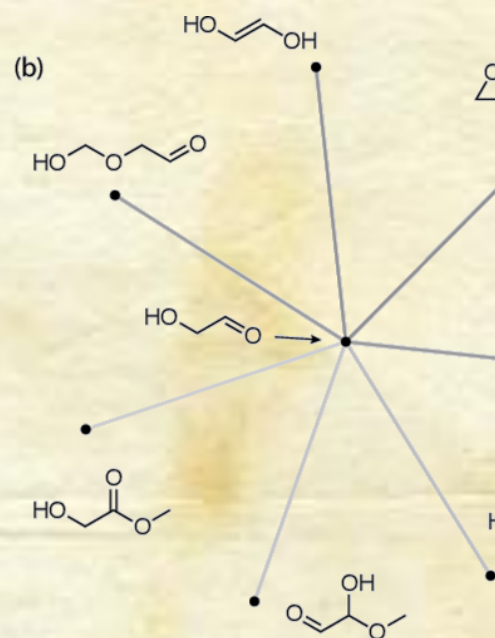
C - He llegado a toparme contra la pared, de ver muchos conceptos que colegas y amigos químicos utilizan tan fácilmente y que yo no puedo. Si no hay algo que pueda yo demostrar, no puedo. A mí se me ha hecho muy claro que todo lo que dicen no siempre funciona ¡y tengo contraejemplos!

JA - Claro, claro. Estás empleando retórica socrática. ¡Claro! Lo haces intuitivamente, lo aplicas, pero la filosofía te ayuda a hacerlo de mejor manera, con mayor número de bases. Es básicamente por eso que decidí estudiar la filosofía de la química.

C - Hablando de filosofía, dentro de sus textos cita mucho a Kuhn, particularmente su idea de revoluciones en la ciencia y cambios de paradigma ¿se considera usted kuhnista? ¿considera que la química es la ciencia que se ajusta más a esta idea de Kuhn?

JA - Hay dos Kuhns, el primero es el que es famosísimo. Kuhn construyó su tesis central acerca de las revoluciones científicas que lo hizo mundialmente famoso. Se pasó la vida pensando sobre eso y al final de

Es lo que hacen los químicos todo el tiempo, pero no decimos que son modelos. El mundo es, y nosotros lo transformamos y lo modelamos.



Rappoport, D.; Galvin, C.; Zubarev, D.; Alán Aspuru-Guzik, A. J. *Chem. Theory Comput.* **2014**, 10, 3, 897-907

Pérez, Y.; Chamizo, J. A. **El abp y el diagrama heurístico como herramientas para desarrollar la argumentación escolar en las asignaturas de ciencias.** *Ciênc.Educ.*, Bauru, **2013**, 19, 499-516.

su vida recapacitó y matizó muchas de las cosas que había dicho. No es que se contradijera, si no que con ambición de aclarar, aclaró. El segundo Kuhn, el más viejo, dice cosas muy... audaces. Asuntos de las rupturas totales, la incommensurabilidad, son menos fuertes, hay una parte de transición mucho más clara, más detectable. Kuhn no hablaba para nada de instrumentos, yo en ese sentido no soy kuhnista, creo que los instrumentos y la práctica material en el laboratorio son centrales. Kuhn era físico, y muchos físicos piensan mucho más en las teorías que en la parte experimental.

C - Pero debe haber en eso algo que nos ate al mundo ¿no? porque al final es lo que queremos describir.

JA - Así es. Hay un cambio de teoría y al día siguiente sigues usando los termómetros, y prendes la luz de la misma manera, aunque haya cambiado la teoría que hay detrás de esto. Entonces el substrato material es fundamental y Kuhn no le presta, en mi opinión, suficiente atención a eso. Pero creo que para enseñar la química es muy correcta o muy apropiada la forma de separarla al menos en cinco grandes etapas. En la mayoría de las facultades de química del mundo se enseña hasta la cuarta, básicamente la tercera, la cuarta en algunos lugares, la quinta en ningún lado. La quinta es en la que vivimos todos.

C - ¿Vivimos en el paradigma de la nanociencia?

JA - Exactamente, todo eso se generó en la quinta revolución, pero eso se estudia en las universidades. Lo que enseñamos siempre es historia de la química.

C - Es lo que ya pasó, no lo que está pasando.

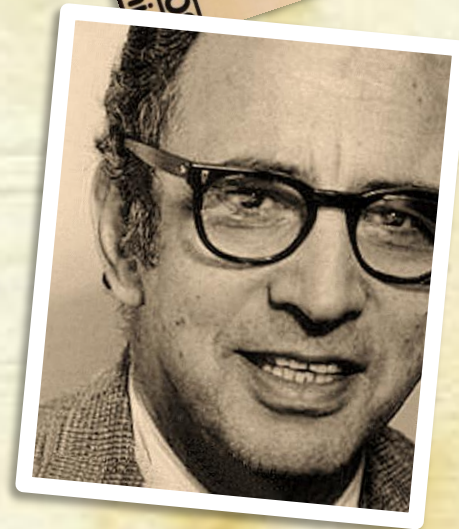
JA - Así es.

C - Pero siempre ha sido así ¿no? Por ejemplo cuando entró la química cuántica, los físicos que trabajaron en eso se basaron en cosas que ya no cuadraron con su nueva teoría.

JA - Así es.

C - Pero esto va a seguir siendo ¿no? es parte del entendimiento, del procesamiento de la nueva información.

JA - Claro, pero entonces está la responsabilidad de la educación que es ¿para qué está preparando a las personas? El acto educativo en cualquier lugar trata de preparar a las generaciones jóvenes para vivir en el



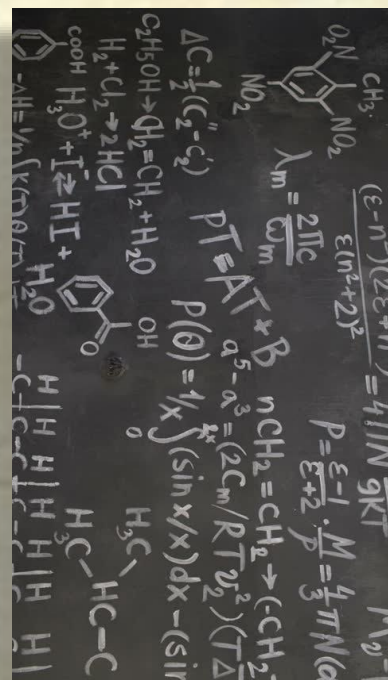
mundo que esa generación supone que van a vivir. Las clases que te dieron a ti, que damos en general, son clases para enseñarte a vivir en el pasado, ¡pero sin decírtelo! Entonces es un engaño, ¿me entiendes?

C - Sí, entonces debe haber otra revolución pero en la enseñanza

JA - Ah no claro, sin duda.

C - Pero ¿cómo?

JA - En Suiza los profesores de bachillerato tienen doctorado en química. ¿Qué es lo que pasa en Finlandia? el primer puesto laboral que se les da a los mejores de cada generación es de profesor. En México el profesor de química es dentista, con todo respeto a los dentistas, no tengo nada en contra, pero es dentista, escogió ser dentista, entonces ¿cómo das una clase de química? no sabes química. Ahí es donde empiezan los problemas. Eso no quiere decir que todo el mundo en México deba ser químico, pero sí se puede buscar que haya una mayor preparación, que haya más trabajo para profesores de la química y que se valore esa enseñanza. En México es muy complicado, pero hay que reconocer que hay experiencias en otros lugares del mundo que pueden servirnos de referencia. Por ejemplo, en México se decidió que el método científico es fundamental y que las competencias científicas son importantes, se enseña desde pre-escolar, obligatorio, eso es una estupidez. En Corea, que hacen teléfonos, barcos y computadoras propias, los niños en pre-escolar aprenden a jugar, no les enseñan competencias de pensamiento científico. Hay que enseñar a jugar a los niños, hay que enseñar a que aprendan a hablar, desde luego tienen que aprender que $2 + 2$ es cuatro, o que las manzanas son diferentes que las peras, o que las flores son diferentes que los frutos.



C - A ver si entiendo, ¿me está diciendo que tenemos conciencia de que es algo importante pero no lo estamos haciendo bien?

JA - No estamos haciendo nada, o muy poco.

C - ¿Y cómo afecta el avance de la tecnología? ¿hace falta la tecnología en la educación?

JA - (Suspira) Debemos tener profesores que sepan lo que deben de saber. No hay mejor herramienta que una persona que sepa lo que tiene que decir. Un individuo, hablamos de México, en Cuernavaca, que se pare un martes a las 10 de la mañana, y que diga “vamos a hablar del ácido sulfúrico, ¡ay qué horrible es el ácido sulfúrico!, ¡pesta!, no mejor ni hablamos, mejor vamos a hablar del partido de fútbol del

Debemos tener profesores que sepan lo que deben de saber. No hay mejor herramienta que una persona que sepa lo que tiene que decir.

América contra el Toluca”. Pues tú como alumna dices “el ácido sulfúrico es un horror”. Si el individuo que llega ahí a las 10 de la mañana en Cuernavaca agarra ácido sulfúrico y lo echa sobre azúcar, que hay azúcar en todo este país, ¿te hicieron esa reacción?

C - No me acuerdo.

JA - No, no te la hicieron, sino te acordarías. Linus Pauling, uno de los grandes químicos del mundo, de la historia, se hizo químico por ver esa reacción: ácido sulfúrico con azúcar. O sea no necesitas un laboratorio con tecnología virtual y extraordinaria, ni *active learning whatsoever*. Eso es lo que necesita el mundo, personas que sepan lo que están enseñando. Como de esas personas hay pocas se suple con tecnología, con imágenes, con teleconferencias, y con libros, pero lo que en el centro es un individuo que sepa qué decir y lo diga.

C - ¿Aplica en enseñanza de todo tipo? ¿también en divulgación?

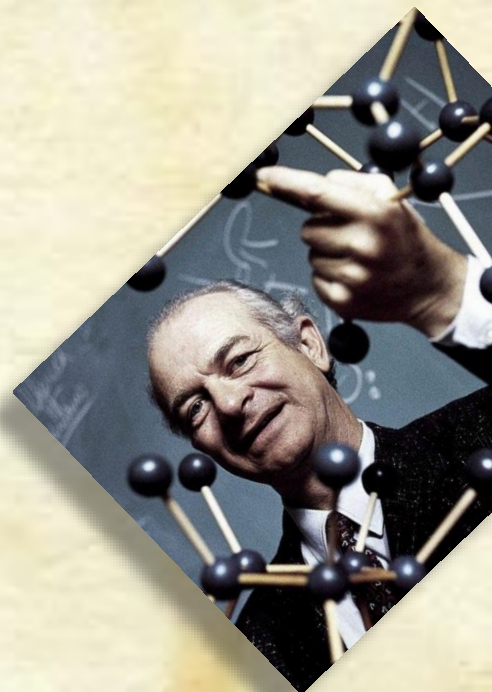
JA - También.

C - Tocando el tema de divulgación, ¿qué tanta ciencia necesitamos divulgar y cómo podemos divulgar?

JA - A ver, yo creo que ahí hay una confusión. Necesitamos divulgar cómo se adquiere el conocimiento que llamamos científico, no lo digo yo, lo dijo Carl Sagan. No sirve de nada publicar que “unos investigadores en Japón acaban de sintetizar el retrovirus 38”. Lo que sirve para vivir mejor es entender cómo se aborda el mundo, esa es la divulgación de la ciencia. Que te pueda sorprender ver el cielo y lo que ves en el cielo, o te pueda sorprender una mariposa que aparece de una crisálida y rompe el capullo, ¡es extraordinario! Hay reacciones extraordinarias. De esa emoción despertar las ganas de saber por qué y poderlo extrapolar. Eso sólo se aprende a través de un individuo que tiene emoción y tiene emoción si le gusta lo que hace y no es un burócrata. Y hay burócratas en la educación, en la ciencia, y en la divulgación.

C - Sí pero hay dos etapas ¿no? Hay el generar esta emoción y luego tener al alcance la información de cómo aprendo esto.

JA - Pero en este mundo, en este momento histórico particular, se puede acceder, hasta un determinado nivel, a mucha de esa información. Yo me acuerdo muy bien con mi hija, hace ya muchos años un día que me preguntó tal cosa, estaba en prepa, y yo le contesté. Después llegó y me dijo “papá, lo acabo de ver en un video en YouTube”. Tú puedes bajar información de cualquier lugar del mundo, hacer *cut*



No todo es *high tech*, lo que hay que aprender es a pensar.

n' *paste* y hacer unos ensayos extraordinarios. El diagrama heurístico está perversamente pensado para que no puedas hacer esto, para que sinteticas lo imprescindible

C - Para que sí haya un proceso de entendimiento

JA - Exactamente, para eso.

C - A ver, ¿entonces qué opina? ¿está a favor de estas nuevas herramientas de divulgación? YouTube, Instagram ¿todo eso?

JA - No, no. Déjame que te diga por qué. Son importantes, sin duda, pero se les ha cambiado el peso, se supone que todo se resuelve con eso, y no, se resuelve con las personas. Durante el gobierno de Fox se pusieron enciclomedias, pantallas táctiles extraordinarias. Yo formé parte del consejo técnico de ese proyecto. Pero en algunas comunidades ni había electricidad. No se puede asumir que todo el mundo vive en la colonia del Valle de la Ciudad de México. Lo que necesitas es que haya personas mejor preparadas para enfrentar las disyuntivas de vivir donde no tienes ciertos recursos. No todo es *high tech*, lo que hay que aprender es a pensar.

C - Nos la pone muy difícil.

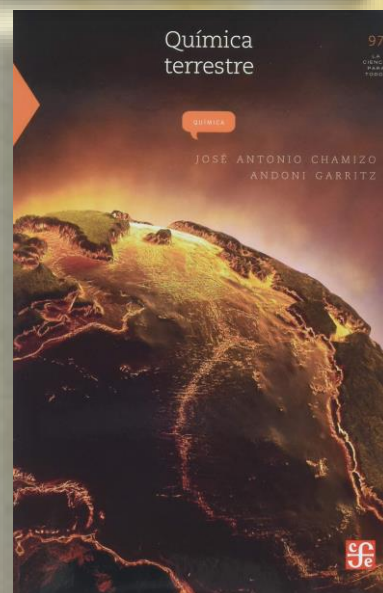
JA - Pero esa es la tarea.

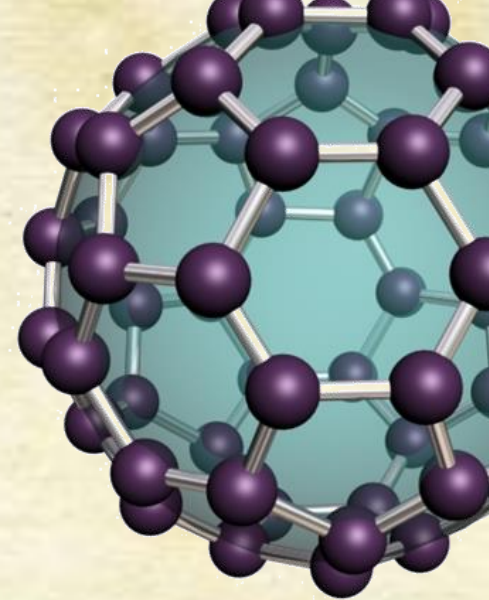
C - Finalmente, ¿prevé o no otra revolución de la química?

JA - No, porque la química ya se acabó.

C - ¿Cómo que la química ya se acabó?

JA - Sí, la química ya se acabó, como todas las cosas, empiezan y terminan ¿cuál es el problema? La química es una práctica social, como todas las demás prácticas. Empezó con los herreros, los alfareros, los curanderos, los panaderos, con todos esos oficios milenarios, iguales en todo el mundo, en todas las culturas. Empezaron a tener un montón de preguntas, a buscar entender por qué. Y las explicaciones eran los dioses, los espíritus, todo eso. Es el momento de la alquimia. La química aparece cuando toda esa cantidad de ideas se le da una explicación "común", que tiene que ver con los elementos de Lavoisier, y eso es la primera revolución. La primera revolución es el nacimiento de la química como disciplina a finales del siglo XVIII. Antes no había química. Entonces, esa disciplina aparece y se desarrolla. A finales del siglo XX en la química decimos que hay átomos, lo aceptamos, los manejamos.





Los físicos dicen que hay cosas mucho más pequeñas que los átomos, pero no nos interesa, porque ni los hadrones ni los muones hacen reacciones químicas. A los químicos nos interesa, de todo ese menú de materia, un pedacito, el que tiene que ver con los átomos. Durante la quinta revolución se aíslan átomos, se modifican átomos, se fotografían, se manipulan. En ese momento ya no podemos trabajar con cosas más pequeñas, ¿te das cuenta? Y ya no hay reacciones más rápidas posibles que tengan que ver con química. Se llega al límite temporal de la química, lo más rápido es atravesar un átomo y no hay nada que atravesase un átomo que nos interese.

A partir de ese momento se está en posibilidades de manipular materia y crear materia biológica con condiciones totalmente arbitrarias derivadas de la química. Se crea un conejo fosforescente, que se llama Alba, con ingeniería genética. O sea, ¡es un conejo que brilla!, eso no es natural. El poder de la manipulación del químico se extiende de manera muy contundente a la biología. Desde ese momento la química impacta al planeta de manera mundial. El adelgazamiento de la capa de ozono es un problema mundial, el efecto invernadero es un problema mundial, empezamos a tomar conciencia de los actos de contaminación. Todos los actos anteriores habían sido locales, pero por primera vez en la historia de la química, de manera mundial, las comunidades químicas dicen “ya no vamos a hacer tal cosa” se ponen de acuerdo y firman el protocolo de Montreal. Firmar el protocolo de Montreal quiere decir: “yo sé hacer esto y no lo hago porque si lo hacemos transformamos la atmósfera”. Dejando a un lado que haya presidentes en el mundo que luego hacen tropelías, la química, como disciplina, llegó a su límite, estableció sus códigos morales. Y pasó otra cosa fantástica ¿tú conoces una molécula que se llama futboleno (o fullereno)? Esa molécula C₆₀ es una sustancia química, la compras en un laboratorio, es un polvito negro, nadie duda que es una sustancia química. En Viena, agarran C₆₀ y la difractan, la convierten en luz y luego vuelve a aparecer como materia. ¡Y vuelve a ser otra vez la molécula esférica! Quiere decir que la materialidad del mundo químico tiene límites, los límites se encontraron en la quinta revolución. Tenemos límites materiales, límites temporales, límites éticos. Lo cual no quiere decir que no haya miles de cosas por hacer, pero ya en un espacio limitado. Se seguirá haciendo química, la tabla periódica se seguirá enseñando, pero se estará enseñando lo que se llama ciencia de materiales, se harán ciencias híbridas, ya no química pura como tal. Lo cual no es un pecado, no es un problema, o sea, no nos hace menos, simplemente establece que hay espacios de desarrollo y los espacios de desarrollo son ahorita en otra dirección.



C - Entonces, ¿está bien tener estos límites morales, sociales o podría ser hasta una limitante para el crecimiento de la ciencia?

JA - La Ciudad de México a partir de este año no hay bolsas de plástico en los supermercados. Muy bien, ¿y qué se va a hacer con el plástico en la ciudad de México? Entonces se desarrollará un proceso para procesar el plástico y se hará, sin duda, eso es química. Pero eso ya lo sabíamos desde hace 50 años. Lo que pasa es que ya nos llegó un momento en que ya no nos queda más remedio, entonces tendremos que diseñar una bacteria que se coma el plástico y produzca proteína animal. Bueno, pero eso no es química ya, es biotecnología, eso ya es otra cosa.

C - OK, no significa que no siga habiendo cosas, sino simplemente ya no va a ser química pura.

JA - Épale.

C - Todo esto lo tengo que procesar, yo creo que necesitamos una segunda charla jaja.

JA - Me encantará.

José Antonio Chamizo Guerrero

Cursó la licenciatura y la maestría en la Facultad de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México y el doctorado en la School of Molecular Sciences de la University of Sussex, en Inglaterra.

Ha impartido más de 100 cursos desde la secundaria hasta el doctorado, publicado más de 110 artículos arbitrados sobre química, educación, filosofía, historia y divulgación de la ciencia y dirigido cerca de 30 tesis de licenciatura, maestría y doctorado.

Es autor o coautor de más de 70 capítulos en libros y de otros tantos libros de texto y divulgación.



Teorías que Explican el Enlace Químico en Moléculas Orgánicas

OCTETO ELECTRÓNICO, ORBITAL MOLECULAR Y ENLACE VALENCIA

Por Catalina M. Pérez Berumen, Eder I. Martínez-Mora

Todos hemos escuchado que la *materia* se define como todo lo que ocupa un espacio, posee masa, forma, peso y volumen, o en palabras más simplistas, todo lo que nos rodea es materia. ¿Pero de qué está hecha la materia? Generalmente está constituida de moléculas; una molécula representa la unidad más pequeña de una sustancia que contiene propiedades características, la cual está formada por una agrupación definida y ordenada de átomos. Recordemos que un átomo es la porción menor de materia de un elemento químico, por consiguiente, podríamos decir que los átomos son las unidades que conforman una molécula.

Si los átomos son las unidades, ¿por qué y cómo se enlazan unos a otros para formar una molécula? La pregunta ¿por qué? es relativamente sencilla de responder; los átomos se unen porque los compuestos resultantes tienen menos energía y, por tanto, son más estables que los átomos separados. La pregunta ¿cómo? es más difícil de responder, y para contestarla los químicos necesitaron saber más acerca de las propiedades electrónicas de los átomos, así se desarrollaron tres teorías fundamentales que soportan la formación del enlace químico covalente: la teoría del *Octeto Electrónico* (OE), la teoría del *Enlace-Valencia* (EV) y la teoría del *Orbital Molecular* (OM). Cada una se desarrolló en ese orden cronológico y su contexto histórico inicia a mediados de los 1800's cuando los químicos afrontaron un desafío que revolucionó a la química: ¿explicar las fuerzas que mantienen unidos a los compuestos!

Quizás, una de las primeras aportaciones para entender el desarrollo de las teorías del enlace se da alrededor del año de 1858, cuando tanto el químico escocés Archibald Scott Couper, como el químico alemán Friedrich August Kekulé von Stradonitz, conocido también como August Kekulé, propusieron de forma independiente la *tetravalencia* del carbono, es decir, que el átomo de carbono forma cuatro enlaces para unirse a otros átomos de carbono y formar cadenas o, con otros elementos, para formar compuestos igualmente estables (Figura 1). Más tarde, en 1865, Kekulé aportó otro avance trascendental cuando sugirió que las cadenas de carbono pueden doblarse sobre sí mismas para formar anillos o compuestos cíclicos. Estas ideas fueron innovadoras para la química, en específico para la química orgánica, pues hasta ese momento no

se había propuesto una forma de explicar el enlace en las moléculas, más tarde estas ideas llevaron al establecimiento de la "Teoría Estructural".

Si bien Kekulé y Couper estaban en lo cierto con la naturaleza tetravalente del carbono, la química se seguía viendo de una manera plana y bidimensional; fue hasta 1874 cuando Jacobus van't Hoff y Joseph Le Bel incorporaron una tercera dimensión a la teoría estructural al proponer que los cuatro enlaces del carbono tenían direcciones espaciales definidas. van't Hoff fue aún más lejos y propuso que los cuatro enlaces del carbono se proyectaban a los vértices de un tetraedro regular, con el carbono en el centro, una idea que algunos colegas de la época no compartían y tachaban de irreal.

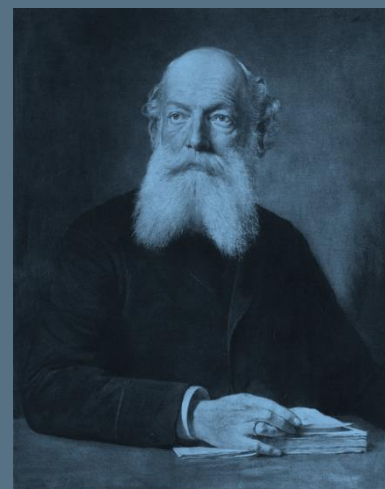


Figura 1. Izquierda: Archibald Scott Couper (1831-1892). Derecha: Friedrich August Kekulé von Stradonitz (1839-1896)

Una de las aportaciones que contribuyó en gran medida al entendimiento de las propiedades de los elementos químicos fue la que realizó el químico ruso Dmitri Ivánovich Mendeléyev entre los años 1860-1869, al clasificar y ordenar en orden creciente respecto a su masa atómica relativa y número de valencia a los elementos químicos que se conocían en esa época. Para este momento ya se sabía que un cierto elemento se podía unir a otros elementos y cuántos enlaces podría formar, pero no se sabía cómo se llevaba a cabo dicha unión.

El estudio de las propiedades periódicas de los elementos permitió entender que ocho electrones (un octeto de electrones) en la capa más externa de un átomo o capa de valencia, imparte una estabilidad especial a los elementos de los gases nobles en el grupo 8. Así mismo, se encontró que la química de otros elementos está regida por su tendencia a adquirir la configuración electrónica del gas noble más cercano, por ejemplo, los metales alcalinos del grupo 1 adquieren una configuración de gas noble perdiendo el único electrón de su capa de valencia, resultando en la forma de un catión; mientras que los halógenos en el grupo 7 adoptan una configuración de gas noble ganando un electrón, para llenar su capa de valencia formando así un anión. Los iones resultantes se mantienen unidos por una atracción electrostática a la cual se le ha llamado *enlace iónico* y es el responsable de mantener unido a la mayor parte de las sales inorgánicas.

La tendencia anterior no aplica para los elementos de los grupos centrales de la tabla periódica, ya que estos tienen más de dos electrones en la capa de valencia y, por lo tanto, requerirían de mucha energía para ganar o perder electrones y así adquirir una configuración de gas noble. Y entonces, ¿cómo forman enlaces los elementos de la parte media de la tabla periódica? La respuesta es relativamente sencilla: estos elementos se unen a otros, no ganando o perdiendo electrones, sino compartiéndolos. A la unión de átomos con electrones compartidos se le llama *enlace covalente* y es el tipo de enlace que detallaremos a

profundidad, dado que los elementos que lo realizan tienen diferentes propiedades periódicas.

Ahora bien, sabemos que los átomos de un elemento pueden unirse compartiendo electrones para formar un enlace covalente, pero ¿cómo es que el compartir electrones conduce al enlace entre átomos? desde un punto de vista más profundo explicado por el lenguaje físico y matemático. Gracias al surgimiento de una nueva mecánica cuántica desarrollada y aplicada principalmente por Heisenberg y Schrödinger, proveyeron a la química dos teorías generales: la teoría del enlace valencia (EV) y la teoría del orbital molecular (OM).

Las dos teorías se desarrollaron aproximadamente al mismo tiempo, pero se separaron rápidamente pues provenían de escuelas químicas que se rivalizaron con el tiempo. Hasta mediados de la década de 1950 la teoría de EV dominó totalmente la química del enlace, posteriormente la teoría del OM se hizo fuerte y dominó, mientras que la teoría de EV cayó en descrédito y quedó casi completamente abandonada. La teoría de EV resurgió fuertemente en la década de 1980 y desde entonces ha disfrutado de un renacimiento tanto en la aplicación cualitativa de la teoría como en el desarrollo de nuevos métodos computacionales e informáticos para su implementación. Cada modelo tiene sus fortalezas y debilidades, y los químicos tienden a utilizarlos de forma indistinta dependiendo de las circunstancias.

TEORÍA DEL OCTETO ELECTRÓNICO O REGLA DEL OCTETO

Las raíces de la teoría EV en química se remontan al famoso artículo de Gilbert Newton Lewis "The Atom and The Molecule", que introduce las nociones de enlace de pares de electrones y teoría del octeto o regla del octeto, la cual fue enunciada en 1916. Básicamente establece que la formación del enlace se explica porque cada átomo tiende a completar sus últimos niveles de energía con una cantidad de 8

electrones o, en otras palabras, a completar su octeto para adquirir la configuración electrónica del gas noble más cercano para adquirir cierta estabilidad.

Esta fue la primera teoría que explicó la formación del enlace químico y la que sentó los cimientos para el desarrollo de las otras dos que retomaremos más adelante. Si bien, este modelo se sigue empleando exitosamente en nuestros días para entender la formación del enlace, siendo el primero que nos enseñan en los cursos de química, es un supuesto que tiene el mismo problema con el que se enfrentaron Kekulé y Couper: un sistema bidimensional y plano que fue rebasado al enfrentarse a una estructura atómica más complicada y real, la tridimensional.

Lewis propuso una forma sencilla de ejemplificar los enlaces químicos en las moléculas en lo que llamó estructuras de electrón-punto, también conocidas como estructuras de Lewis, en las cuales se representan sólo los enlaces de la última capa de valencia de un átomo y son representados por puntos. Por ejemplo, la molécula de metano cuya fórmula molecular es CH_4 ; en este caso el carbono aporta cuatro electrones de valencia y los cuatro hidrógenos comparten un electrón cada uno para que el carbono adquiera el octeto electrónico y conseguir la configuración electrónica del gas noble inmediato (neón), mientras que los átomos de hidrógeno adquieren la configuración del gas noble helio (Figura 2).

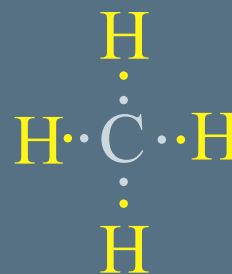


Figura 2. Estructura electrón-punto para la molécula de metano.

TEORÍA DEL ENLACE VALENCIA

Uno de los trabajos fundamentales para el establecimiento de la teoría de enlace valencia (EV) fue el desarrollado por el físico Erwin Schrödinger, quien en 1926 empleando la mecánica ondulatoria propuso y resolvió una entidad matemática, la función de onda, que está relacionada con la probabilidad de encontrar una partícula en un punto dado en el espacio. La resolución de la función de onda dio pauta para que se pudieran graficar y dar forma a lo que hoy conocemos como orbitales atómicos, base para entender y comprender la formación del enlace químico.

La teoría de EV fue introducida en 1927 por el físico alemán Walter Heinrich Heitler y su colega, el físico teórico estadounidense Fritz Wolfgang London, los cuales trabajaron en Zurich con Schrödinger, en lo que formularon como la teoría de Heitler-London, la cual se basa en conceptos conocidos para aquella época, como la configuración electrónica de los elementos, la existencia de orbitales atómicos donde se alojan los electrones, así como su capacidad para traslaparse y, finalmente, que los orbitales atómicos podrían mezclarse o hibridarse para formar nuevos orbitales atómicos.

La teoría de EV establece que se forma un enlace cuando dos átomos se aproximan lo suficiente entre sí, esto es posible cuando un orbital atómico ocupado por un electrón se traslapa con otro orbital atómico ocupado por otro electrón, de tal forma que se comparte un par de electrones, quedando apareados entre los orbitales que se traslapan; dichos electrones son atraídos por los núcleos de ambos átomos, resultado en la unión de estos mediante un enlace. En términos generales podemos decir que el traslape de los orbitales atómicos da como resultado la formación de un enlace químico.

El enlace H-H en la molécula de H_2 es el ejemplo más simple, el cual resulta a partir del traslape de los dos orbitales 1s de los hidrógenos ocupados cada

uno por un electrón. Dicha reacción de formación de enlace es factible debido a que los átomos iniciales (de manera separada) contienen mayor energía que la molécula enlazada de H_2 , explicada por alcanzar la configuración electrónica del gas noble inmediato, el helio.

No obstante, el acercamiento de los átomos es fundamental, ya que si están muy alejados no podrían compartir electrones de enlace y si están muy cercanos los núcleos de los átomos se repelerían debido a que ambos están cargados positivamente. Por lo tanto, existe una distancia óptima entre los núcleos de los átomos que lleva a la estabilidad, a esta se le conoce como longitud de enlace y tiene asociada una fuerza de enlace. Cada enlace covalente tiene una fuerza de enlace y una longitud de enlace características.

Esta teoría explica fehacientemente la formación del enlace entre moléculas diatómicas como el H_2 o Cl_2 , pero la situación se complica cuando se tiene que explicar la formación del enlace en moléculas orgánicas más complejas entre átomos de carbono y heteroátomos (átomos de elementos diferentes al carbono y al hidrógeno, por ejemplo, oxígeno, nitrógeno, azufre, etc.). De hecho, una de las limitaciones más importantes de la teoría de EV es que no puede explicar en su totalidad la tetravalencia del carbono, dado que tiene 4 electrones en la capa de valencia y solo dos de ellos desapareados con los cuales podría formar dos enlaces.

No obstante, en 1931 el químico, el bioquímico y activista estadounidense Linus Pauling propuso una solución a dicha limitación, publicado en su obra *The Nature of the Chemical Bond* (La Naturaleza del Enlace Químico), en la cual desarrolló el concepto de hibridación de los orbitales atómicos, con lo que dio explicación contundente de la tetravalencia del carbono, las tres hibridaciones que adopta (sp^3 , sp^2 y sp), su geometría y sus ángulos de enlace para unirse a otros átomos de carbono, así como a heteroátomos.

TEORÍA DEL ORBITAL MOLECULAR

Casi al mismo tiempo en que Pauling estaba desarrollando sus aportaciones a la teoría de EV, Robert S. Mulliken y Hund estaban desarrollando un enfoque alternativo llamado teoría del Orbital Molecular (OM). Esta teoría aparece en 1932, pero las raíces del método se remontan a trabajos anteriores de 1928. Adicionalmente, los trabajos desarrollados por Erich Hückel a principios de la década de 1930, donde inicialmente tuvieron una recepción fría, pero finalmente terminaron por dar impulso a la teoría OM. Hückel sentó las bases de lo que hoy se conoce como la 'Regla de Hückel' creando una herramienta exitosa y ampliamente aplicable relacionada con la estabilidad especial de las moléculas "aromáticas" con $4n+2$ electrones π . Esta regla y su extensión a la "antiaromaticidad" terminaron por enamorar a los químicos orgánicos en las décadas de 1950 y 1970, constituyendo un efecto importante para la aceptación de la teoría OM y el rechazo de la teoría EV.

Básicamente, la teoría del OM trata de explicar la formación del enlace a través de la combinación (de forma matemática) de orbitales atómicos (interpretados como funciones de onda) abarcando a varios átomos para formar orbitales moleculares. A los nuevos orbitales formados se les llama orbitales moleculares porque atañen a toda la molécula, no solo a los átomos responsables de formar el enlace. La formación de este orbital molecular es análoga y se puede extrapolar al concepto de orbital atómico, el cual describe una región en el espacio donde existe la mayor probabilidad de encontrar un electrón, pero en un nivel atómico; por el contrario, un orbital molecular describe una región en el espacio donde es más factible de encontrar electrones, pero a nivel molecular.

Un concepto importante en esta teoría es que al igual que un orbital atómico, un orbital molecular posee forma, tamaño y energía específica, estas

características hacen que esta teoría presente un cierto grado de dificultad porque cada molécula tiene orbitales moleculares propios.

Tomemos como modelo la formación del enlace σ (sigma o enlace sencillo) en una molécula simple como el H_2 , en la que dos orbitales atómicos $1s$, cada uno de un átomo de H con un solo electrón se combinan para formar dos orbitales moleculares; esta combinación de orbitales se puede llevar a cabo de dos maneras, una aditiva (constructiva) o una sustractiva (destruktiva). La combinación aditiva produce un orbital molecular de menor energía, mientras que la combinación sustractiva forma un orbital molecular de mayor energía, cada uno de ellos con distinta forma y tamaño. Por regla general, el mismo número de orbitales atómicos que se combinan para formar un enlace generará igual número de orbitales moleculares. Para el caso la molécula de H_2 , el orbital molecular de menor energía adopta una forma de huevo, mientras que el de mayor energía adopta una forma de mancuerna alargada con un nodo entre los núcleos de los átomos que forman el enlace. Un nodo en un orbital representa una región ausente de densidad electrónica o en otras palabras una región en el espacio donde existe una probabilidad mínima de encontrar electrones. En un diagrama energético, los orbitales atómicos son representados a los costados mostrando los electrones de manera independiente y con el mismo spin; los orbitales moleculares son ilustrados en la parte central, dibujando el orbital molecular de enlace en la parte baja y el de antienlace en la parte superior. Nótese que los electrones apareados responsables del enlace se ubican apareados en el orbital molecular de más baja energía (Figura 3).

La combinación aditiva siempre tendrá menor energía que los orbitales atómicos $1s$ por separado, a este se le llama orbital molecular de enlace porque los electrones en este OM se encuentran en la región internuclear responsables de mantener enlazados a los átomos. Por otro lado, la combinación sustrac-

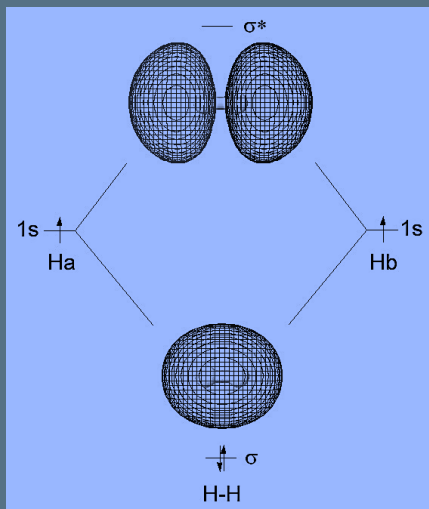


Figura 3. Orbitales moleculares de la molécula de H_2 .

tiva provoca que el orbital molecular tenga más energía que los orbitales atómicos $1s$, por lo que se le llama orbital molecular de anti-enlace, debido a que los electrones no pueden ocupar la región central entre los núcleos (porque el nodo) y, por lo tanto, no pueden contribuir al enlace (repulsión de núcleos).

Otro modelo sencillo y de igual forma importante se presenta en los orbitales moleculares π de enlace y antienlace, los cuales resultan de la combinación lateral de dos orbitales atómicos p , muy similar que la explicada en la teoría de enlace-valencia. El orbital molecular π de enlace tiene menor energía que los orbitales atómicos p que lo generan y resultan de una combinación de lóbulos laterales con el mismo signo algebraico, mientras que el orbital molecular π de antienlace tiene una mayor energía y es resultado de una combinación de los lóbulos laterales con signos algebraicos opuestos generando un nodo entre los núcleos atómicos (Figura 4).

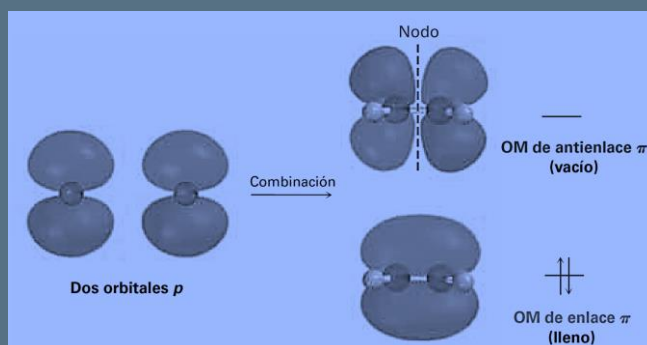


Figura 4. Orbitales moleculares π .

CONCLUSIÓN

El entendimiento del concepto de enlace no es un tópico que esté concluido y buena parte de la química actual está enfocada en aclarar de forma confiable todas las variantes necesarias. Una de las herramientas más útiles con las que se cuenta actualmente es la química computacional y teórica, ya que los modelos matemáticos necesarios para modelar a un enlace son tremendamente complicados y la cantidad de datos generados son muchos, de ahí la necesidad de herramientas con gran capacidad de procesamiento.

BIBLIOGRAFÍA

- Shaik, S.; Hiberty, P. C. Valence Bond Theory, its History, Fundamentals, and Applications. A Primer. *Rev. Comput. Chem.*, 20, 1-24.
- Smith, M. B., March, J. (2007). *March's advanced organic chemistry: reactions, mechanisms, and structure*, sixth edition. United States of America: John Wiley & Sons, Inc.
- Hornback, J. M. (2006). *Organic chemistry*, second edition. United States of America: Thomson Learning, Inc.
- McMurry, J. (2012). *Química Orgánica*, octava edición. Ciudad de México: Cengage Learning.
- Wade, L. (2011). *Química orgánica volumen 1*, séptima edición. Ciudad de México: Pearson Education, Inc.

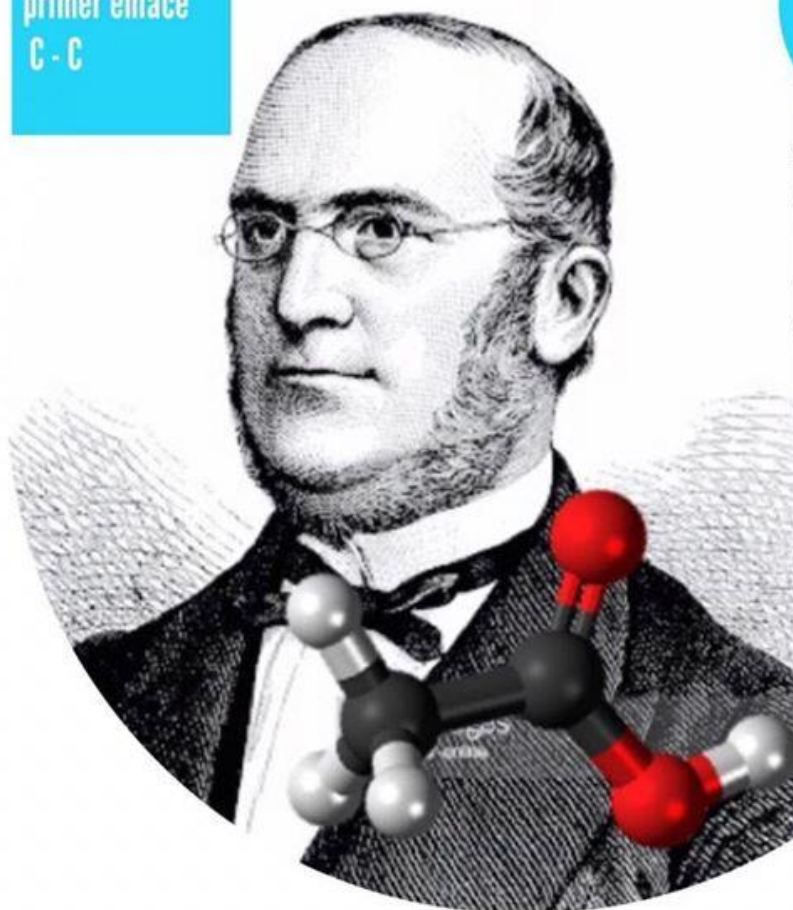
1845

Hermann Kolbe publicó la síntesis de ácido acético

la formación del primer enlace C - C

EL PRIMER ENLACE CARBONO-CARBONO

El golpe final a la Teoría vitalista



Muchos consideran este hallazgo como la primera síntesis orgánica de la historia debido a que fue planeada y no descubierta, como la síntesis de urea de Wöhler, su maestro

[FACEBOOK.COM/QUIMIOFILIA](https://www.facebook.com/quimiofilia)

INTRODUJO EL TÉRMINO SÍNTESIS

IDEÓ TAMBIÉN UNA SÍNTESIS DE ÁCIDO SALICÍLICO QUE LLEVA SU NOMBRE

FUE UN DURO CRÍTICO DE OTROS QUÍMICOS. LLEGÓ A AFIRMAR QUE LAS NUEVAS GENERACIONES NO PODRÍAN APORTAR ALGO A LA CIENCIA

Enlace de Coordinación

Por Edna Zúñiga

El enlace químico tiene que ver con una “unión” entre dos átomos; en dicha unión existen fuerzas de atracción que mantienen unidos a los átomos para formar nuevas sustancias.

Las uniones se pueden dar de múltiples formas, por ejemplo, aquella en la que dos átomos comparten sus electrones enlazantes (o electrones de valencia) de manera equitativa, esto formará un **enlace covalente**. Por ejemplo, consideremos que **A** y **B** son átomos no metálicos que interactúan entre sí bajo estas condiciones: si **A** comparte 1 electrón, **B** comparte 1 electrón también; si **A** comparte 2 electrones, **B** está dispuesto a proporcionar 2 electrones, en una última opción, **A** comparte 3 electrones y recibe por igual 3 electrones de **B** como se muestra en la Figura 1.

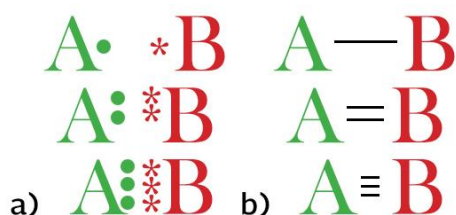


Figura 1. a) Representación de la compartición equitativa entre el átomo **A** y **B** b) Representación del enlace sencillo, doble y triple entre el átomo **A** y **B**

En 1916 el Químico Gilbert Newton Lewis, profesor de química de la Universidad de California en Berkeley, postuló que un enlace químico entre dos átomos **A** y **B** puede producirse si comparten un par de electrones.

Dar y recibir electrones equitativamente para formar enlace sencillo, doble o tri-

ple es el fundamento del enlace covalente, sin embargo, al seguir por el camino de examinar cómo se llevan a cabo las uniones, nos topamos con un tipo especial de enlace que también tiene que ver con compartición de electrones, pero esta vez, es **no equitativa**.

Imagina que eres un átomo muy dadivoso, siempre dispuesto a aportar electrones para formar enlaces, te desvives por unirse covalentemente con otro átomo, pero esta vez, sucede que el átomo elegido no ve necesaria la compartición equitativa, tu relación ideal de enlace covalente deja de existir y ahora entras al mundo del **enlace covalente coordinado**, ¿cuál es la diferencia entre enlace covalente y covalente coordinado? Pareciera una diferencia pequeña y sutil, pero de hecho es muy importante.



Figura 2. Diferencia entre el enlace covalente y el enlace covalente coordinado.

Gracias a la estructura de Lewis de la Figura 2 podemos identificar cuáles son los electrones de **A** y cuáles son los de **B**. En la formación de este enlace los electrones provienen del mismo átomo. En este caso decimos que el átomo **B** se está “coordinando” al átomo **A**, vemos que **A** no proporciona ningún electrón, el único átomo donador es **B** ya que son sus electrones los que permiten que el enlace se lleve a cabo, recordemos que todavía es una compartición pero ahora no es equitativa.

Analicemos la definición de **enlace covalente coordinado**, conocido también como “enlace dativo”:

aquel que se forma cuando una “Base de Lewis” cede o dona un par de electrones no compartidos en su capa exterior de valencia a un “Ácido de Lewis”, el cual carece de suficientes electrones de valencia para formar un octeto (configuración de gas noble) y por ende acepta o recibe un par de electrones.

En la Figura 2, el átomo **B** es la **Base de Lewis** al brindar su par de electrones al átomo **A** quien funge como **Ácido de Lewis**. Recordemos que 2 electrones forman un enlace, en este caso, el enlace covalente coordinado se forma únicamente gracias a que la Base de Lewis es la responsable de donar del par electrónico.

En la Figura 3 se muestra que el enlace covalente coordinado se representa con una flecha en el sentido de la donación (del donador al receptor).

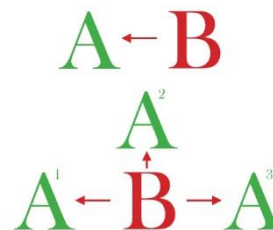


Figura 3. Representación del enlace covalente coordinado.

Por ejemplo, en el amoníaco, el átomo de Nitrógeno perteneciente a la familia VA, posee 5 electrones de valencia, tres de ellos los dispone para formar enlaces covalentes sencillos con tres

átomos de Hidrógeno y por lo tanto le sobra un par de electrones libre. De acuerdo a la teoría de Lewis esta molécula es estable pues ha formado el octeto y se comporta como Base.

En la formación del ion amonio, la especie H^+ corresponde a un ácido de Lewis al no tener ningún electrón y estar 100% dispuesta a recibir el tan anhelado par electrónico que le permitirá unirse por coordinación al NH_3 , la Figura 4 revela lo que sucede:

Es importante reconocer que en la formación del enlace covalente coordinado se genera una distribución desigual de la carga electrónica, en el amoníaco, el Nitrógeno recienente una “pérdida” en su densidad electrónica dejándole un valor de carga formal de +1 resultado de la donación de dos electrones.

En la comprensión del enlace covalente coordinado es pertinente mencionar que la Química de Coordinación es la rama de la Química Inorgánica que estudia el

comportamiento de complejos o compuestos de coordinación. En un complejo de coordinación, un átomo o ion central está coordinado por una o más moléculas o iones llamados **ligantes** que actúan como **Bases de Lewis**, formando enlaces coordinados con el átomo o **ion central**; este último actúa como **Ácido de Lewis**. Los átomos de los ligantes unidos directamente al átomo o ion central son conocidos como átomos donadores.

Por ejemplo, en el complejo cloruro de hexaamin cobalto (III), los ligantes NH_3 se coordinan al centro metálico y en este caso el N es el átomo donador. Observa la Figura 5:

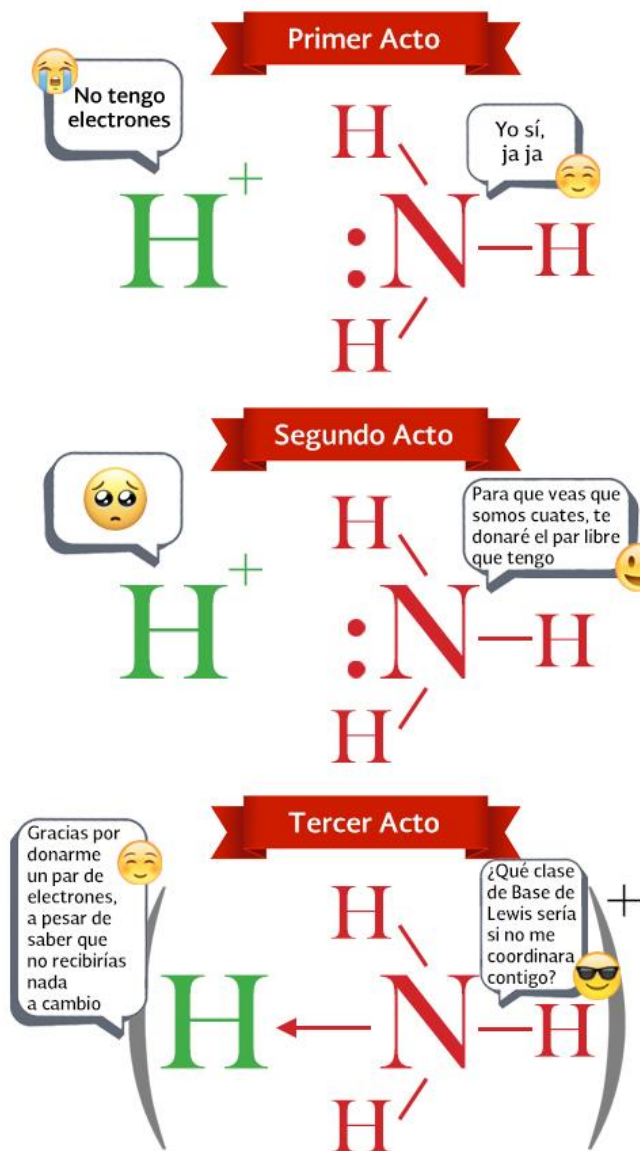


Figura 4. Representación de la formación de un enlace covalente coordinado

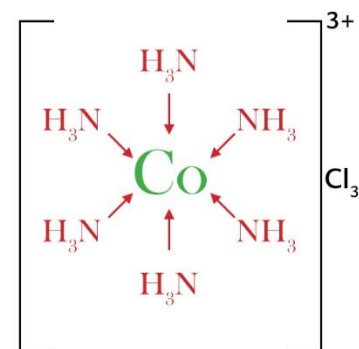


Figura 5. En el complejo $[Co(NH_3)_6]Cl_3$ el N es el átomo donador.

Las investigaciones en Química de Coordinación se llevaron a cabo entre los años 1875 y 1915 por el químico danés S. M. Jorgensen y por el suizo Alfred Werner (en su obra clásica *Neuere Anschauungen auf dem Gebiete der anorganischen Chemie* en 1906 “New ideas on Inorganic Chemistry”). Cuando ellos comenzaron sus estudios, la naturaleza de los compuestos de coordinación era desconocida.

¿En qué consiste la Química de Coordinación? Supongamos que trabajamos con una sal MCl_n , donde M representa un metal y Cl_n representa cierto número de cloruros. Si esta sal se combina con cierta porción de amoníaco (xNH_3), se forma un compuesto del tipo $M(NH_3)_xCl_n$ con propiedades completamente nuevas, pero con enlaces y estructura totalmente desconocida.

Para formular su teoría de compuestos de coordinación, Werner utilizó 4 complejos de cloruro de cobalto (III) con amoniaco que habían sido descubiertos y nombrados de acuerdo a sus colores. La Tabla 1 enumera esta serie de compuestos producto de la reacción del cloruro de cobalto (III) con amoniaco.

Estos compuestos tienen colores distintos. Incluso los dos últimos de la lista, ambos formulados como $\text{CoCl}_3 \cdot 4\text{NH}_3$, son de diferente color. Los compuestos de la Tabla 1 son electrolitos fuertes, pero producen diferente número de iones al disolverse en agua. Por ejemplo, cuando se disuelve $\text{CoCl}_3 \cdot 6\text{NH}_3$ en agua se forman cuatro iones por unidad de fórmula, (es decir, el ion $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ y tres iones Cl^-), en tanto que el $\text{CoCl}_3 \cdot 5\text{NH}_3$ produce sólo tres iones por unidad de fórmula (es decir, el ion $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]^{2+}$ y dos iones Cl^-).

Asimismo, la reacción de estos compuestos con la adición de un exceso de nitrato de plata da lugar a la precipitación de cantidades variables de cloruro de plata de acuerdo a las siguientes reacciones:



**Esta reacción ocurre para ambos complejos

Vamos a traducir las reacciones:

Cuando se trata $\text{CoCl}_3 \cdot 6\text{NH}_3$ con un exceso de $\text{AgNO}_3(ac)$, se producen tres moles de $\text{AgCl}(s)$ por mol del complejo, de modo que los tres iones Cl^- de la fórmula reaccionan para formar $\text{AgCl}(s)$.

Cuando se trata $\text{CoCl}_3 \cdot 5\text{NH}_3$ con $\text{AgNO}_3(ac)$ de forma análoga, sólo se precipitan dos moles de $\text{AgCl}(s)$ por mol de complejo.

Por último, cuando se trata $\text{CoCl}_3 \cdot 4\text{NH}_3$ con $\text{AgNO}_3(ac)$, sólo precipita una mol de $\text{AgCl}(s)$.

Tabla 1. Propiedades de algunos complejos de cobalto (III) con diferentes porciones de amoniaco. *Werner demostró que las moléculas neutras estaban directamente enlazadas al metal, de manera que el Cloruro de Cobalto (III) hexa-amoniaco ($\text{CoCl}_3 \cdot 6\text{NH}_3$) está formulado como $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3$.

Fórmula original	Color	Nombre original del complejo	Formulación correcta	Estructura
$\text{CoCl}_3 \cdot 6\text{NH}_3$	Anaranjado -Amarillo	Lúteo	$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3$	
$\text{CoCl}_3 \cdot 5\text{NH}_3$	Púrpura	Purpúreo	$[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]\text{Cl}_2$	
$\text{CoCl}_3 \cdot 4\text{NH}_3$	Verde	Práseo	Trans- $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2]\text{Cl}$	
$\text{CoCl}_3 \cdot 4\text{NH}_3$	Violeta	Vióleo	Cis- $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2]\text{Cl}$	

A pesar de tener exactamente la misma cantidad de cloro, la cantidad de cloruro de plata es variable, entonces Werner llegó a una conclusión importante a partir de la correlación entre número de moléculas de amoniaco y el número de equivalentes de cloruro de plata que precipitan: que en esta serie de compuestos, el cobalto muestra un número de coordinación (número de átomos unidos directamente al ion metálico) constante de 6 (dispuestos de forma octaédrica); a medida que las moléculas de amoniaco se eliminan, son reemplazadas por iones cloruro; estos iones

cloruro ahora se comportan como si estuvieran unidos al cobalto y no como iones cloruro libres.

Para escribir fórmulas de compuestos de coordinación, Werner sugirió usar paréntesis rectangulares a fin de separar de otras partes del compuesto los grupos que están dentro de la esfera de coordinación. Propuso, por tanto, que es mejor escribir $\text{CoCl}_3 \cdot 6\text{NH}_3$ y $\text{CoCl}_3 \cdot 5\text{NH}_3$ como $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3$ y $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]\text{Cl}_2$, respectivamente.

Las ideas de Werner explicaban también por qué hay dos formas claramente distintas de $\text{CoCl}_3 \cdot 4\text{NH}_3$. Con base en los postulados de Werner, se formula el compuesto como $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2]\text{Cl}$. Como se muestra en la Tabla 1, hay dos formas diferentes de disponer los ligandos en el complejo $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2]^+$ conocidas como formas *cis* y *trans*. Werner recibió el premio Nobel de Química en 1913 por su investigación al respecto de los complejos de coordinación.

DATOS INTERESANTES

* Algunos compuestos existen como **dímeros y polímeros** debido a la formación del enlace covalente coordinado. En el siguiente ejemplo de la estructura del Al_2Cl_6 (Figura 6), el cloro dona un par electrónico al Aluminio que funge como receptor:

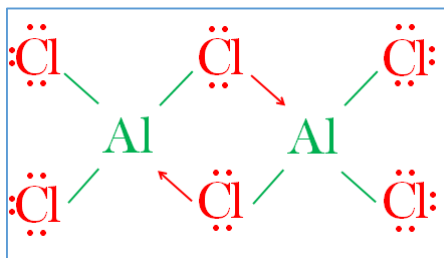


Figura 6. Representación de los enlaces covalentes coordinados entre el Cloro y Aluminio.

* El **Azul de Prusia** fue el primer compuesto de coordinación conocido y descubierto por accidente. Inicialmente los complejos del hierro $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ (*ferrocianuro*) y $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$ (*ferricianuro*) interactúan de la siguiente manera:

El Fe^{2+} reacciona con ferrocianuro de potasio para obtener un precipitado azul oscuro llamado Azul de Prusia cuya fórmula es $\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ (hexaciano ferrato (II) de potasio); mientras que cuando se trata de la reacción de Fe^{3+} con ferricianuro de potasio se obtiene un precipitado bastante similar, denominado azul de Turnbull cuya fórmula es $\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ (hexaciano ferrato (III) de potasio). Estos compuestos de hierro se utilizan como pigmentos en pinturas, tintas, cosméticos y papel heliográfico.

* Los complejos de coordinación tienen importantes aplicaciones, por ejemplo, el compuesto denominado "**cis-platino**" (Figura 7) se emplea en tratamientos de quimioterapia para destruir células cancerosas, su fórmula es *cis*- $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2]$ (diaminodicloro platino (II)) y actualmente es utilizado para combatir cáncer testicular, de vejiga, pulmón, esófago, estómago y ovario.

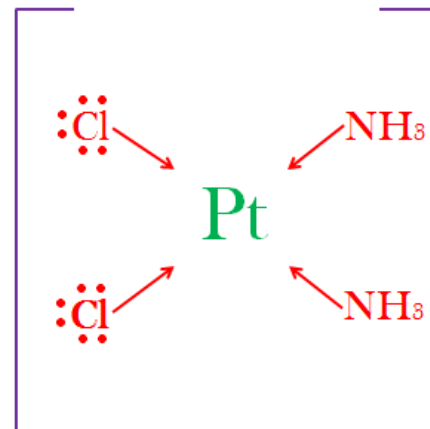


Figura 7. *cis*-platino.

BIBLIOGRAFÍA

- Ander, P.; Sonnessa, A. J. **Principios de Química. Introducción a los conceptos teóricos**. Ed. Limusa, 1993.
- Cotton, F. A.; Wilkinson, F. A.; **Química Inorgánica Básica**, Ed. Limusa, 1999.
- Shriver, D.F.; Atkins, P. W.; Langford, C. H. **Química Inorgánica** Ed. Reverté, 1998.
- Manku, G. S. **Principios de Química Inorgánica**, Ed. McGraw-Hill, 1983.
- Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G. **Química Inorgánica**, Ed. Pearson, 2006.
- Basolo, F.; Johnson, R. **Química de los compuestos de coordinación**, Ed. Reverté, 1967.
- Petrucci, R. H.; Herring, F. G.; Madura, J. D.; Bissonette, D. **Química General**, Ed. Pearson, 2011.

La Revista
QUIMIOFILIA
Divulgación de la Ciencia Química

Ya tiene ISSN
(International Standard Serial Number)
Número Internacional Normalizado de
Publicaciones Seriadadas



Revista
QUIMIOFILIA

2020

AÑO
3

Renueva o
adquiere tu
suscripción
anual por
290 pesos
IVA incluido

6 REVISTAS AL
PRECIO DE 5

Disponible en www.quimiofilia.com

Whatsapp 777 128 02 23. Correo: informacion@quimiofilia.com

Por
Fabiola N. de la Cruz
Liliana Cantú Sifuentes

LÍNEA DE TIEMPO DE LA TEORÍA ÁCIDO-BASE

La teoría de ácido-base es una herramienta que a diario usamos. Conceptos que se usan porque desde hace varios siglos se han ido implementando para ser lo que hasta ahora conocemos y aplicamos; y más, porque es el primer fenómeno que ocurre en cualquier transformación antes que cualquier otra (claro, si hay un hidrógeno ácido disponible). Al hablar de la teoría ácido-base siempre se piensa en tres o cuatro etapas, percepciones y protagonistas (Arrhenius, Brønsted-Lowry, Lewis y Pearson), sin embargo, para llegar al concepto de ácido-base que tenemos actualmente requirió de muchos años y eventos, por lo que nos adentraremos de una manera cronológica de cómo fueron surgiendo las bases de esta teoría.

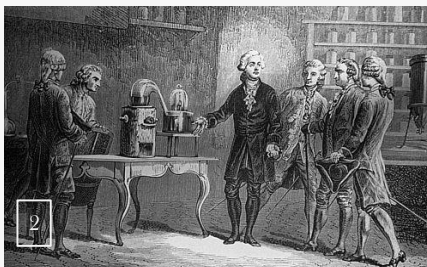
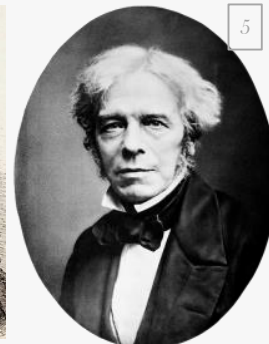
Todo comenzó con el químico, físico e inventor Irlandés Robert Boyle (1627-1691, 1), quién hizo una subdivisión de las sustancias por sus características, en la cual el término *ácido* lo relacionó con aquellas sustancias que tenían un sabor ácido, corroen el metal y cambiaban el litmus tornasol (una tinta extraída de los líquenes) a rojo. Asimismo, lo *básico* era aquello resbaladizo y que cambiaba el litmus a un color azul, llamando a las bases álcalis.

Pasados casi 100 años, en 1776 el químico, biólogo y economista francés Antoine-Laurent de Lavoisier (2) fue el primero en proporcionar los conceptos de ácido y base, restringiéndose a los ácidos como los oxo-ácidos, definiéndolos en términos del oxígeno contenido. Por sus aportes sobre la respiración animal, estudio del aire, la teoría calórica y de combustión, el estudio de la fotosíntesis y por la Ley de Conservación de la Materia o Ley Lomonósov-Lavoisier, es que es considerado como el "Padre de la Química Moderna".

Ya para 1811, el químico británico Sir Humphrey Davy (3) demostró con mucho éxito el comportamiento de los ácidos y de las bases usando un modelo electroquímico, en el cual proponía que los ácidos eran aquellos compuestos que disueltos en agua liberaban iones hidrógeno (H^+) y las bases eran aquellas que en

Solución acuosa liberaban iones hidroxilo (OH^-). Además, es considerado el padre de la electroquímica junto con Michael Faraday y Alessandro Volta por sus estudios de la electroquímica explorando el uso de la batería o pila Volta.

Junto con el esplendor de los grandes descubrimientos y científicos, se encuentra a Michael Faraday (5), un físico y químico británico que es reconocido por sus aportaciones en el área del electromagnetismo y la electroquímica. En 1834 des-



Al igual que Sir Davy, el químico y físico francés Joseph-Louis Gay-Lussac (4) durante 1809-1815 hizo varios experimentos demostrando que el cloro no era un ácido sino un elemento (ya que se conocía como ácido muriático oxigenado), además que descubrió el ácido cianhídrico e hizo mejoras en la industria química para la síntesis de los ácidos sulfúrico y oxálico. Gay-Lussac definió que los ácidos y las bases no debían definirse por sí mismo unos en función de los otros. Sin embargo, Lussac es más reconocido por su formulación de la ley de los gases.

cubrió que los ácidos, las bases y las sales eran electrolitos, por lo que disueltos en agua se disocian en partículas con carga que pueden conducir la corriente eléctrica.

En 1838 Justus von Liebig (6) un químico alemán en su obra de la composición química de los ácidos orgánicos, clasificó a los ácidos como una sustancia que contiene hidrógeno y que puede ser reemplazado por un metal.

Con todo lo aportado de los grandes científicos de la época, el físico y químico sueco Svante August Arrhenius (7) en 1884 cimentó la teoría que lleva su nombre, plasmando sus resultados en su tesis Investigación sobre la conductividad galvánica de electrolitos, en la cual definió los ácidos como sustancias que en solución acuosa aumentan la concentración de iones hidronio (H_3O^+) o de iones hidrógeno (H^+), mientras que las bases son aquellas que aumentan la concentración de iones oxidrilo (OH^-). Arrhenius fue galardonado con el Premio Nobel de Química en 1903 por sus aportaciones en el campo de la disociación electrolítica.

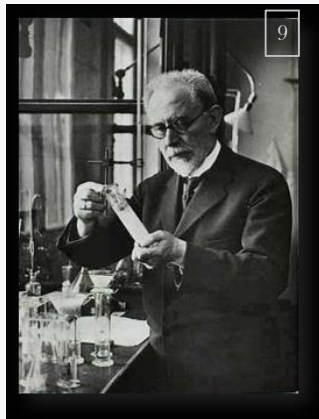
Ya para finales de siglo XIX, por 1890 Friedrich Wilhelm Ostwald (8), químico y filósofo alemán, había estudiado la velocidad de ininidad de reacciones químicas, incluyendo las reacciones que ocurrían en la presencia de ácidos y bases. Además, había inventado un equipo de conductividad eléctrica para medir la cantidad de iones H^+ en una solución. Fue galardonado con el Premio Nobel de química en 1909 por su trabajo sobre catálisis y sus investigaciones sobre los principios fundamentales que rigen los equilibrios químicos y las velocidades de reacción.

A inicios de siglo XX, en 1909, el químico danés Søren Peter Lauritz Sørensen (9), dio al mundo una gran aportación. Todo fue gracias a su trabajo en los laboratorios de la industria de cervezas Carlsberg, enfocándose en la acidez que se producía con la fermentación de las enzimas se dio cuenta que la concentración de iones hidrógeno (H^+ , protones) desempeñaban un papel clave en estas reacciones. Debido a que los valores de iones H^+ , para la mayoría de las soluciones, son demasiados pequeños y difíciles de comparar, Sørensen ideó una forma sencilla de expresarlos, ésta consistía en calcular el logaritmo negativo de la concentración, así se obtenían valores sencillos y manejables dentro de una escala conveniente, que denominó pH (*pondus hydrogenii*: potencial de hidrógeno). Debido a sus aportaciones, este químico danés fue nominado hasta 13 veces al Premio Nobel, sin embargo, nunca se le fue otorgado (9).

Alrededor de los años 1920's, el físico y químico danés Johannes N. Bronsted (10a) y el físico y químico británico Thomas Martin Lowry (10b), cimentaron la teoría de

Brønsted-Lowry. Primero, Brønsted en 1906 había publicado su trabajo sobre la afinidad electrónica y para 1923 se adentró en la teoría protónica de las reacciones ácido-base, esto fue simultáneo con el de Lowry. Así, establecieron la teoría que ahora conocemos, en donde llegaron a la conclusión de que los ácidos son sustancias capaces de donar un protón (H^+), mientras que las bases son capaces de aceptarlos. Mientras que Brønsted hizo trabajos sobre los isótopos del mercurio;

ces de aceptar un par de electrones; mientras que las bases son aquellas sustancias con capacidad para donar un par de electrones. Además, casi al final de su carrera probó que la fosforescencia de las moléculas orgánicas estaba regida por un estado de excitación triplete y llegó a calcular sus propiedades magnéticas. Lewis fue nominado 41 veces al Premio Nobel de química sin poderlo ganar. Murió en su laboratorio de un infarto donde trabajaba con ácido cianhídrico, para el trágico des-



Lowry destacó en la química orgánica y en la ionización en soluciones acuosas.

A la par de los trabajos de Brønsted-Lowry, el fisicoquímico estadounidense Gilbert Newton Lewis, —famoso por su trabajo de diagramas de punto para estructuras, por sus estudios de la relación masa-energía (1908), por acuñar el término fotón en 1926, así como por su concepto de enlace covalente (1916)— en 1923 planteó la teoría del par electrónico para las reacciones ácido-base. Lewis definió que los ácidos son sustancias capa-

enlace hubo rumores en la época de que se suicidó. ¿Acaso fue su depresión por no haber ganado el Premio Nobel? (11).

Para 1937, el químico alemán Hermann Lux (12a), propuso una teoría ácido-base en términos de transferencia de ion óxido (O^{2-}), en la cual un ácido se describe como una sustancia que acepta especies óxido y una base como un compuesto que dona iones óxido. Este concepto se aplica a sistemas de óxidos fundidos a altas temperatura de utilidad en geoquímica y en electroquímica de sales fundidas

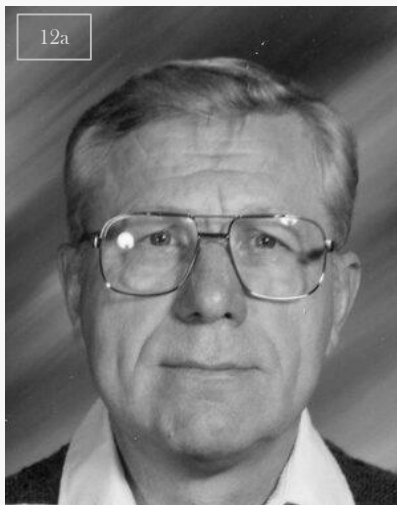
La teoría fue mejorada en 1947 por el químico noruego Håkon Flood (12b). Generalmente, un ácido de Lux-Flood es un anhídrido ácido y una base un anhídrido básico (óxido metálico).

También en 1939, el químico ruso Mikhail Illyich Usanovich (13) publicó una teoría ácido-base más generalizada que la de Lewis y no restringida a los compuestos que contienen hidrógeno. En esta propuesta un ácido es una sustancia química que acepta especies negativas o que actúa como donadora de especies positivas; y una base es una sustancia química que admite especies positivas o que participa como donadora de especies negativas. Esta apreciación se acerca considerablemente al concepto de equilibrio de oxidación-reducción y de ahí surgen ciertas dificultades ya que los procesos redox se visualizan más como una transferencia de electrones, que un evento de formación o de ruptura de enlaces.

Por último, tenemos al químico estadounidense Ralph Gottfrid Pearson (14), quien es conocido por el desarrollo del concepto de ácidos-bases duros y blandos (HSAB, hard and soft acids and bases) propuesta en 1963, con la intención de unificar los conceptos de reactividad en química inorgánica y orgánica; además de ser la más utilizada en nuestros tiempos. En esta teoría el término duro se aplica a especies químicas relativamente pequeñas, que tienen estados de oxidación altos y que son débilmente polarizables; el término blando se ajusta a especies químicas relativamente grandes, que tienen estados de oxidación bajos y que son fuertemente polarizables. En esta teoría la interacción ácido-base más estable se da entre ácido-duro/base-duro y ácido-blando/base-blanda. El profesor Pearson nació en 1919 y a sus 102 años de edad continúa haciendo asesorando trabajos en química teórica como profesor emérito de la Universidad de California en Santa Bárbara.

Al dar una ojeada al pasado y ver los datos históricos, nos damos cuenta de que el concepto ácido-base viene de antaño y que poco a poco fue transformándose en lo que ahora conocemos y aplicamos. El arduo trabajo en la experimentación, la constancia y perseverancia de los dife-

rentes científicos fueron contribuyendo a las teorías que conocemos. Quizás dentro de unos años más cambien otros aspectos, perspectivas o se tengan nuevos descubrimientos a considerar, y lo que conocemos hoy quedará como anécdota o servirá como cimientos a lo que nos depare el futuro.



BIBLIOGRAFÍA

The Nobel Prize.

www.nobelprize.org/prizes/chemistry

Copyright©Nobel Media AB 2020.

Science History Institute. Chemistry.
Engineering. Life Sciences.

<https://www.sciencehistory.org/>

Copyright©2020 Science History Institute.

Encyclopedia Britannica.

<https://www.britannica.com/biography/>

Copyright©2020 Encyclopedia Britannica, Inc.

Sørensen, S. Enzyme Studies II. The Measurement and Meaning of Hydrogen Ion Concentration in Enzymatic Processes. Biochemische Zeitschrift. 1909, 131-134 y 159-160.

Alberto López. S.P.L. Sørensen, el bioquímico danés que nos familiarizó con el pH. 2018. El País. ©Ediciones el País S.L.

Polvitos vemos, cantidades no sabemos

SOBRE EL CONCEPTO DE MOL Y EL FACTOR UNITARIO

Por Cristina González

En las prácticas de laboratorio desde el principio nos explican que las reacciones se hacen con ciertas medidas y proporciones. Nos enseñaron que si diez átomos de oxígeno reaccionaron, el producto también debe contener de alguna forma esos 10 átomos de oxígeno, porque como lo dijo Lavoisier:

“car rien ne se crée, ni dans les opérations de l’art, ni dans celles de la nature, et l’on peut poser en principe que, dans toute opération, il y a une égale quantité de matière avant et après l’opération ; que la qualité et la quantité des principes est la même, et qu’il n’y a que des changements, des modifications”^{*1}

¿así o más claro?

Todo esto suena muy bien, pero yo nunca he visto un átomo o una molécula en el laboratorio. ¿Cómo sabemos cuántas moléculas o cuántos átomos están reaccionando? Sí, me van a decir que todo eso está en la tabla periódica y que cada elemento tiene una masa molar. ¿Y cómo sabemos eso? ¿Cómo sabemos cuántas moléculas hay en 1 miligramo de aspirina? –porque, ¿quién no hizo aspirina al menos una vez en su vida?–, o ¿quién fue el genio de vida infinita que se detuvo a contarlas todas?. Sé lo que están pensando, seguro fue el famoso ese de Avogadro, pues no, él tampoco las contó. Para responder a todas estas preguntas vamos a tener que echar un vistazo a la historia de la química.

^{*} Porque nada se crea, ni en las operaciones del arte, ni en las de la naturaleza, y podemos afirmar en principio que, en toda operación, hay una cantidad de materia igual antes y después de la operación; que la cantidad de los elementos es la misma, y que sólo hay cambios, modificaciones.

Volvamos al siglo XIX, cuando John Dalton propone su teoría atómica (1808, 1810). A pesar de que para nosotros la idea de átomo suena muy buena y natural, en su época no fue tan bien recibida, sus contemporáneos no estaban muy convencidos de las ideas de Dalton, entre ellos Joseph Louis Gay-Lussac. Gay-Lussac (1808) encuentra en sus experimentos que se necesitan dos volúmenes de hidrógeno y uno de oxígeno para formar dos volúmenes de agua, que 1 de nitrógeno y 3 de hidrógeno producen dos volúmenes de amoníaco, entre otras combinaciones. De estas observaciones surgió su ley de combinación de volúmenes que dice que cuando los gases reaccionan, se combinan en volúmenes con relaciones simples 1:1, 1:2, 1:3, y así sucesivamente. Este trabajo sirve de base para el italiano Avogadro, quien además de proponer que los átomos de un gas, a los que llamaba moléculas elementales, podían combinarse entre sí para formar moléculas integrales, da un pasito más adelante proponiendo que volúmenes iguales de diferentes gases contienen el mismo número de partículas, y por lo tanto que la relación entre la masa de los gases también tiene que ser la relación de la masa de las partículas que lo contienen. Esta segunda aportación es a lo que se le llama la hipótesis de Avogadro.²

Vamos a detenernos aquí un poquito porque esto es importante, y para no perder las buenas costumbres, vamos a explicar cómo relacionar el concepto de peso atómico y la hipótesis de Avogadro con peras y manzanas. Imaginémonos que tenemos dos cajas idénticas, del mismo volumen, una tiene peras y otra tiene manzanas (Figura 1). No sabemos cuántas peras o cuántas manzanas hay en cada caja pero creemos que son el mismo número de frutas en ambas. Si sabemos cuánto pesan las cajas sin las frutas, entonces también sabemos el

peso del conjunto de frutas. Asumiendo que ambas cajas contienen el mismo número de frutas, podemos saber el peso promedio relativo de una pera y de una manzana. Finalmente, si definimos el peso de una como un estándar, determinaremos el peso de la otra automáticamente.

Volviendo a la historia, tuvo que pasar más de medio siglo para que el austriaco Josef Loschmidt estimara el número de partículas contenidas en un centímetro cúbico a condiciones ideales, que es a lo que se conoce como la constante de Loschmidt. Y fue hasta 1909 que el físico francés Jean Baptiste Perrin quien, basado en el movimiento Browniano de las partículas en los gases ideales, determina el número de partículas en 32 gramos de oxígeno, y quien llama por primera vez a este número como “número de Avogadro” reconociendo la importancia de su hipótesis.³ Obtener una estimación más precisa del número de Avogadro fue posible en 1910, cuando Robert Millikan midió por primera vez la carga de un electrón: $1.60217653 \times 10^{-19}$ Coulomb por electrón. En ese momento, gracias al trabajo

de Faraday, se conocía la cantidad de carga en un mol de electrones, que es lo que llamamos constante de Faraday. En consecuencia, si dividimos la constante de Faraday entre la carga de un electrón se obtiene el número de electrones en un mol. Así fue como se determinó por primera vez ese número que aprendemos de memoria en la secundaria: 6.022×10^{23} .

¿Y desde cuándo le llamamos mol al mol y qué significa? Desde hace mucho tiempo existía la idea de que cantidades específicas de varias sustancias pueden reaccionar de manera similar y en la misma proporción con otras sustancias. Sin embargo, se podría decir que el antepasado del concepto de mol fue el concepto de equivalente químico de Henry Cavendish (1767) y Jeremias Richter (1795). William Wollaston, en 1814, popularizó este término y lo utilizó en elementos, definiendo que un equivalente químico de un elemento corresponde a su masa atómica. El equivalente químico expresado como una medida en gramos es exactamen-

te a lo que hoy definimos como mol, es también por eso que lo llamamos así, o mole en inglés, porque se deriva del alemán *molekulargewicht*, que significa “peso molecular”.

Entonces, mol es simplemente una unidad de medida, y sirve para cuantificar la cantidad de sustancia química.⁴ Su primera definición formal fue en 1971 en la Conferencia General de Pesos y Medidas, en donde se definió como: la cantidad de sustancia que un sistema contiene en entidades elementales como átomos hay en 0.012 kilogramos de carbono 12, y su símbolo es “mol”. Nota: las entidades elementales deben ser especificadas y pueden ser átomos, moléculas, iones, electrones u otras partículas.⁵ Por muchos años la definición de mol estuvo atada a la definición de kilogramo. Hasta hace muy poco, en Noviembre del 2018, las unidades de kilogramo y de mol, entre otras, fueron redefinidas por el Instituto Nacional de Estándares y Tecnología (NIST por sus siglas en inglés). La definición actual de mol no cambió el significado de la unidad de medida, simplemente se eligió para que experimentalmente la masa de un mol de una sustancia, en gramos, fuera igual a la masa promedio de una molécula, en Dalton, de esa sustancia. Para hacer esta estimación se utilizó espectroscopía de masas y esferas de silicio de alta pureza, obteniendo el valor de $N_A = 6.02214076 \times 10^{23}$ partículas.⁶

Bueno ¿y ahora? ¿cómo usamos esta unidad de medida y para qué me sirve? Agárrense porque viene el concepto de factor unitario, el cual es una constante de conversión, un número real, expresado como una fracción en la que el denominador y el numerador se encuentran en unidades diferentes pero que representan cantidades equivalentes. De esta manera, multiplicar por un factor unitario es lo mismo que multiplicar por 1, de ahí el nombre. Pero no se espanten, y que me disculpe el señor editor en jefe de Quimiofilia, en realidad podemos entenderlo como la manera correcta y formal de plantear una Regla de 3.**

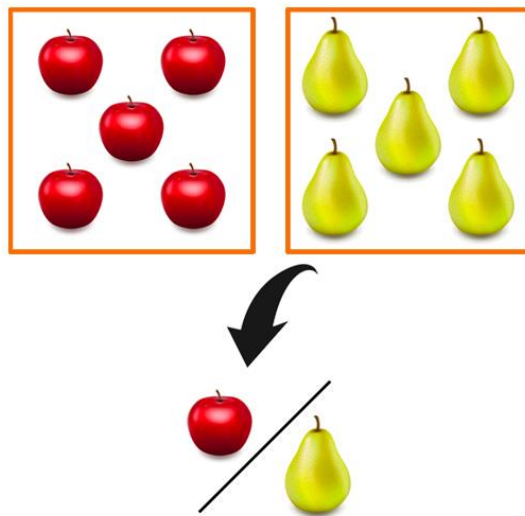


Figura 1. Representación de la hipótesis de Avogadro con peras y manzanas. Asumiendo el mismo número de partículas en un volumen específico, la relación entre los pesos de dos sustancias debe corresponder con la relación entre los pesos de las partículas que las conforman. Las cajas representan el volumen específico conocido, las manzanas y las peras representan partículas ideales en estado gaseoso.

** Perdonada. No quiero discutir aquí enfrente del Respetable.

Para dar un ejemplo regresemos al concepto de mol. Si quiero saber cuántas moléculas de Cloruro de Sodio (NaCl) hay en un miligramo de sal, necesito conocer su masa molar, que es la masa de una sustancia en 1 mol de la misma. Entonces, para obtener el número de moléculas, lo que tengo que hacer es utilizar los factores unitarios correctos para convertir de miligramos a gramos, de gramos a moles, y de moles a partículas:

$$mg \text{ NaCl} \times \frac{1 \text{ g}}{1000 \text{ mg}} \times \frac{1 \text{ mol}}{58.44 \text{ g}} \times \frac{6.022 \times 10^{23} \text{ moléculas}}{1 \text{ mol}}$$

$$= 1.030 \times 10^{19} \text{ moléculas NaCl}$$

De la misma manera pueden ser utilizados otros factores unitarios para cualquier conversión de unidades. Por ejemplo, para cambiar de unidades de concentración, algo súper útil en las prácticas de laboratorio ¿no?.



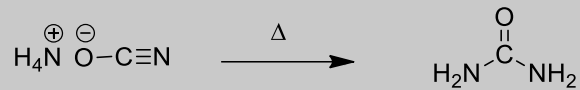
Credit: photo: R. Press/NIST; graphic design: N. Hanacek/NIST[6]

BIBLIOGRAFÍA

1. Lavoisier, A. [Traité Élémentaire de Chimie, présenté dans un ordre nouveau, et d'après des découvertes modernes](https://library.si.edu/digital-library/book/traiteyeylement1lavo) (1 ed.), Paris, **1789**: Cuchet, Libraire. <https://library.si.edu/digital-library/book/traiteyeylement1lavo>
2. Cruz-Garriz, D.; Chamizo, J. A.; Garriz, A.; Estructura atómica, Addison-Wesley Iberoamericana S.A., Wilmington, Delaware, E.U.A., **1987**, págs. 6-8.
3. Perrin, J. From Brownian Movement and Molecular Reality. <http://web.lemoyne.edu/~giunta/perrin.html>.
4. Barrows, N. J. Mole Concept -, Chemistry Encyclopedia forum, Advameg, Inc., <http://www.chemistryexplained.com/Na/Na/Mole-Concept.html>.
5. 'Atomic weight' -The name, its history, definition, and Units, International union of pure and applied chemistry, inorganic chemistry division commission on atomic weights and isotopic abundances, Pure&App. Chem., Vol. 64, No. 10, pp. 1535-1543, 1992. Printed in Great Britain. @ 1992 IUPAC.
6. How Was Avogadro's Number Determined?, Scientific American, a Division of Springer Nature America, Inc., Feb 16, **2004**.

SINTEISIS ORGÁNICA

De forma oficial, la síntesis orgánica comenzó con la obtención de la urea por Wöhler en los albores del siglo XIX¹ y además termino con teoría vitalista de Berzelius (Esquema 1):



Esquema 1. Síntesis de urea de Wöhler

Esta reacción describe de forma sencilla la definición de la Síntesis Orgánica: obtener compuestos orgánicos –complejos– a partir de materiales sencillos y comercialmente disponibles –o fáciles de preparar–. En la reacción del Esquema 1 el cianato de amonio se obtuvo de cianato de potasio y cloruro de amonio (el subproducto cloruro de potasio, no participa en esta reacción).

La química orgánica se descubrió desde que la humanidad (así como la conocemos: *Homo erectus*- *Homo sapiens*) utilizó el fuego. La simple utilización de éste para cocinar o mantenerse a una temperatura agradable en una cueva implicó una de las reacciones químicas más simples: la combustión. Esto dio inicio el conocer el valor alimenticio y de forma accidental el farmacológico de algunos alimentos, vegetales o frutos. Por la parte alimenticia descubrir el sabor al cocinar los alimentos: ¡imaginemos la caza del mamut y el posterior festín! Solo como dato adicional, en México y principalmente en Coahuila se han descubierto restos de Mamut;² y recientemente en la república hermana de Tultepec, Estado de México, también restos de estos formidables animales.³

El valor farmacológico es difícil de datar: las civilizaciones milenarias como la egipcia, china, mesopotámica, griega y por supuesto las de este lado del Atlántico: los mexicas, mayas, incas entre otras, ya conocían la forma de remediar los padecimientos más comunes como los desordenes estomacales, respiratorios y también cómo mitigar el dolor.

Este conocimiento milenario –Medicina tradicional–, es la base de la industria farmacéutica moderna. Es conocido por todos, que hay una relación inseparable (a veces tormentosa, a veces con una sinergia impresionante) entre la enfermedad y la química.

Es conocido que la humanidad se caracteriza por su pensamiento: analítico (¿por qué?), científico (¿Cómo? ¿Cuándo? ¿Dónde?) y aplicado (práctico). La necesidad de aliviar nuestras deficiencias y las opciones que se plantearon para ello desataron el surgimiento

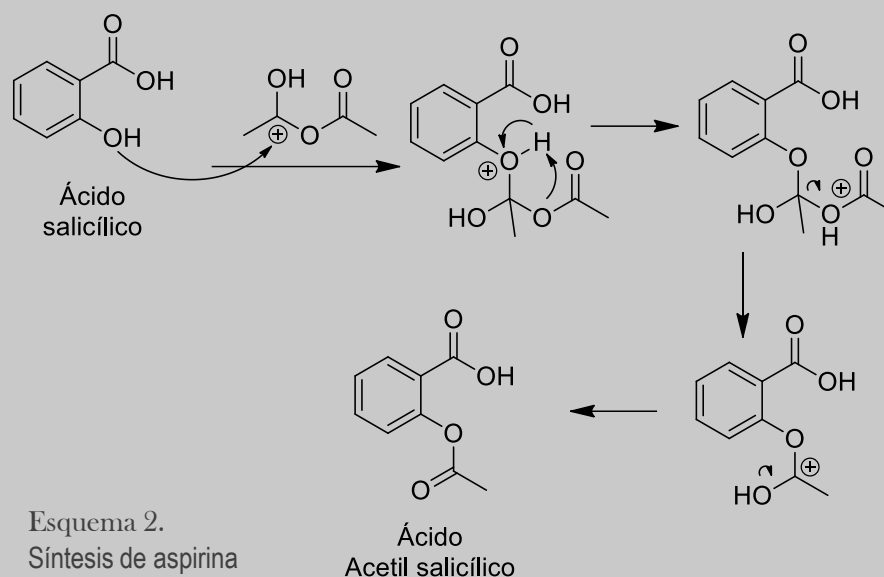


Por Evin Granados

de la química orgánica y su primera división: síntesis orgánica y química de productos naturales. OJO: ¡estamos hablando del siglo XIX aun! A continuación, se mencionan algunos ejemplos memorables que muestran la enorme importancia de la Síntesis Orgánica:

ASPIRINA

Uno de los medicamentos mas populares y antiguos es la Aspirina® (Ácido acetil salicílico) manufacturada por la empresa Bayer.⁴ Su producción masiva tuvo como base el saber que la corteza del sauce tenia efectos anti-piréticos y analgésicos y era utilizada en las culturas egipcias y sumerias desde hace miles de años. Durante principios del siglo XIX se aisló (mediante extracción) e identificó el principio activo de la corteza de sauce, el ácido salicílico y durante algunos años se usó como tal, sin embargo, este ácido y sus sales (o salicilatos) eran muy agresivos para el estómago ya que causaban severas úlceras en quienes lo consumían de forma regular. Durante el último cuarto del siglo XIX la empresa Bayer, hasta esos años manufacturera de pigmentos textiles, iniciaba investigaciones en el campo de la farmoquímica, uno de sus colaboradores, el químico alemán Felix Hoffmann preparó en 1895 el derivado acetilado del ácido salicílico: la aspirina (Esquema 2). Pronto se descubrió que este nuevo derivado seguía conservando las propiedades terapéuticas de su precursor, pero sin sus efectos irritantes.



Esquema 2.
Síntesis de aspirina

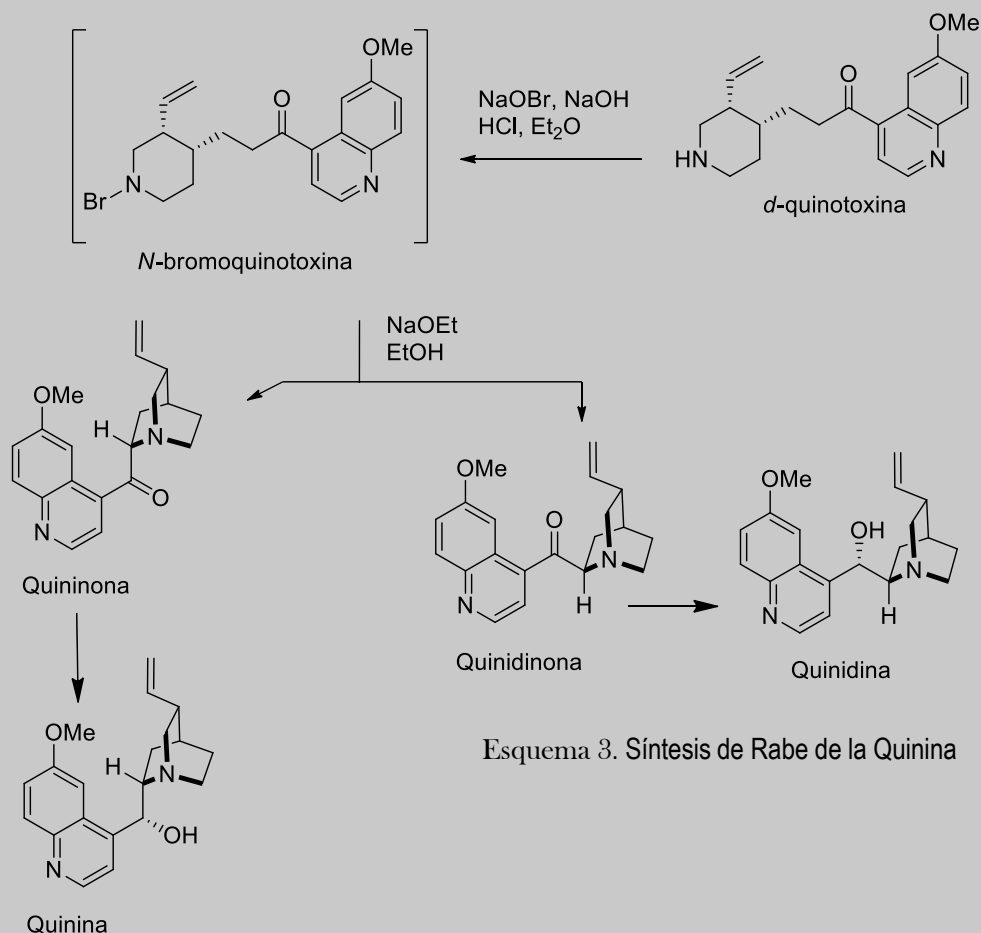


En el Esquema 2, se observa la síntesis de Aspirina a partir del ácido salicílico y de anhídrido acético. Un subproducto es el ácido acético por lo que en ocasiones puede llegar a oler a vinagre al tomarlas. La primera síntesis utilizó cloruro de acetilo y fue realizada en 1853 por el químico francés Gerhardt. Con esta fantástica solución, respondieron las cuestiones fundamentales que giraban en torno a los mecanismos del dolor: ¿Por qué tengo el dolor? ¿Cómo lo alivio? ¿Cómo genero la solución? ¿Cómo la llevo a cabo? ¿Es fácil/ posible de hacer?

La producción masiva de la Aspirina comenzó en 1899. Se comercializaba en forma de polvo (500 mg o 0.5 g) y posteriormente se comercializó en tabletas.

QUININA

Durante los albores del siglo XX, ocurre el segundo boom de la química orgánica. En Alemania (¡nuevamente!) el químico Paul Rabe logró la primera síntesis total de la quinina a partir de la quinotoxina.⁵



Esquema 3. Síntesis de Rabe de la Quinina

Esta síntesis implica una serie de metodologías químicas de alto nivel ¡y fue hecha en 1918! No había Resonancia Magnética Nuclear, ni mucho menos espectroscopia de masas. Perkin intentó su síntesis, sin embargo no obtuvo la molécula correcta.⁶ Rabe fue quien encontró la conexión correcta entre todos los átomos de carbono.⁷

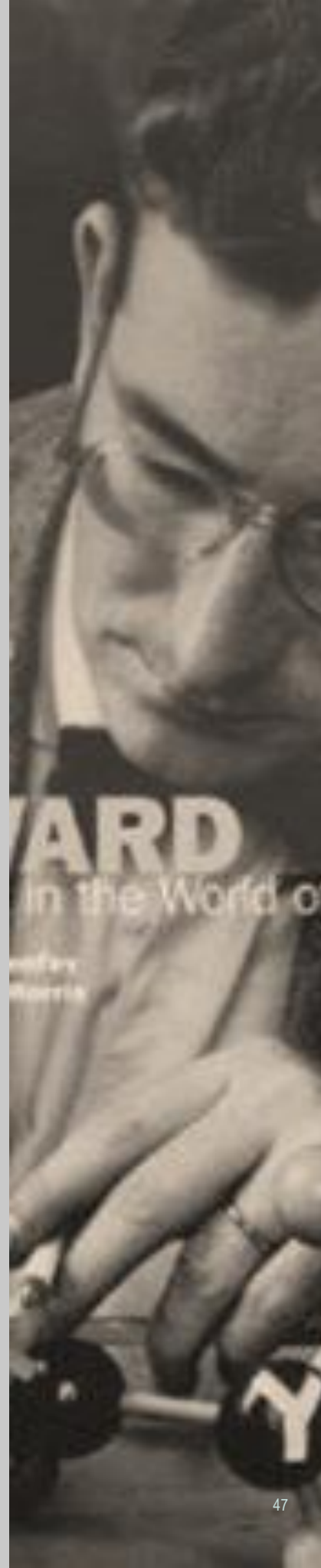
La quinina tiene propiedades anti-maláricas y esta fue la razón de que generara interés en los durante la Segunda Guerra Mundial. Con la incorporación de los Estados Unidos en el conflicto, se inició la incursión en zonas geográficas donde imperaba y causaba bajas considerables una enfermedad tropical: la malaria. Los antiguos quechuas, aliviaban la malaria (causada por la picadura del mosquito *Plasmodium falciparum*) con una corteza de cinchona (o árbol de Quina). Como mencionamos anteriormente, Rabe confirmó su estructura.

Y fue así que llegamos a la Era de Robert Burns Woodward, considerado el más grande químico sintético de todos los tiempos, durante la mitad del siglo XX; quién también decidió hacer su versión de la quinina.⁸ Su trabajo fue de tal elegancia y lo mostro con una lógica química tan simple que elevo el status de la Síntesis Orgánica al del *State of the art*; algo así como el *Estado del Arte* pero que a nivel académico y científico se considera del más alto nivel: arte puro.

Tal fue el efecto de Woodward en la cultura americana, que llegó a ser portada de la revista *Life*; algo comparable con ser el *youtuber* o *influencer* más reconocido en nuestros tiempos.

Finalmente, no nos podemos despedir sin mencionar a Elias Corey –quien por cierto sostuvo una de las disputas académicas más famosas de la historia de la ciencia con Woodward⁹–. El mérito de Corey fue el desarrollo de una metodología inequívoca de raciocinio de transformaciones sintéticas para llegar a una molécula específica, por complicada que pudiera parecer: La Retrosíntesis. Además, de la mano de muchos otros químicos, Corey ha desarrollado durante décadas nuevos métodos y reactivos de síntesis y hoy por hoy se le considera uno de los pilares vivientes de la química.

Como pueden observar, a través de estas líneas y estos ejemplos (uno simple y el otro muy complejo) vemos la aplicación real de la Síntesis Orgánica: la mejor herramienta química para preparar prácticamente cualquier molécula o metabolito que deseemos.





REFERENCIAS

1. Cohen, P.; Cohen, S. **Wöhler's Synthesis of Urea: How Do the Textbooks Report It?** *J. Chem. Educ.* **1996**, *73*, 883.
2. <https://www.jornada.com.mx/2010/04/22/ciencias/a02n1cie>
3. <https://www.eldiariodecoahuila.com.mx/nacional/2019/11/7/hallan-restos-de-14-mamuts-852463.html>
4. Diarmuid, J. **Aspirin: The Remarkable Story of a Wonder Drug**. Bloomsbury Publishing USA. (2008). [ISBN 9781596918160](https://www.bloomsbury.com/9781596918160/).
5. Rabe, P.; Kindler, K. *Chem. Ber.* **1918**, *51*, 466.
6. Perkin, W. H. *J. Chem. Soc.* **1896**, *69*, 596.
7. Rabe, P.; Ackerman, E.; Schneider, W. *Ber.* **1907**, *40*, 3655.
8. R. B. Woodward, W. E. Doering, *J. Am. Chem. Soc.* **1944**, *66*, 849-849.
9. Granados E. **Una Idea Robada y Tres Titanes Defendiéndola**, *Quimiofilia*, **2019**, *10*, 51.

MARZO
13 Y 14



VALIDACIÓN DE MÉTODOS
ANALÍTICOS Y APLICACIONES
ESTADÍSTICAS

GUADALAJARA

Hotel Mesón ejecutivo



2721591886
2721591815



Grupo IDAII

www.grupoidaai.com

ESTEREO QUÍMICA

Por Thalía Oseguera

Uno de los conceptos más importantes al momento de pretender describir un fenómeno químico en nuestros días es la estereoquímica. Los aspectos tridimensionales de las reacciones, las estructuras e incluso de los tejidos vivos y sus procesos; y el mismo origen de la vida en este planeta, por mucho, solo pueden ser entendidos y medidos al considerar que los átomos y las moléculas no son especies planas y en muchos casos, ni siquiera simétricas.

Los inicios de la estereoquímica se remontan al siglo XIX, cuando el físico francés Jean-Baptiste Biot investigaba la naturaleza de la luz polarizada en un plano. Observó que cuando una luz polarizada en un plano pasa a través de una disolución de ciertas moléculas orgánicas, se rota el plano de polarización, pero que esta propiedad no aplicaba para todas las sustancias orgánicas.

El francés, Louis Pasteur en 1849, mientras trabajaba con sales de ácido tartárico obtenidas de la producción de vino, observó que al cristalizar el ácido tartárico se precipitaban dos

tipos de cristales que eran imágenes especulares que se relacionaban como la mano derecha se relaciona con la mano izquierda. Pasteur separó en dos partes los cristales formados y los clasificó como “diestros (d)” e “izquierdos (l)”, Figura 1.

Posteriormente, Pasteur hizo una mezcla 50:50 de los cristales diestros e izquierdos y al medir la actividad óptica, ésta era una, en cambio, las disoluciones de los cristales por separado eran ópticamente activas, sus rotaciones tenían la misma magnitud, pero diferían en su signo. Concluía que ambos cristales tenían propiedades físicas idénticas pero diferían en la dirección en la que sus disoluciones rotaban en el plano de la luz polarizada, mencionando que debía haber un arreglo asimétrico inverso u opuesto.

No fue hasta el año de 1874, que Jacobus H. van't Hoff y Joseph Achille Le Bel, por separado, propusieron una explicación que involucró un cambio fundamental en los conceptos aceptados en esa época y una explicación a los estudios de Pasteur: si los cuatro grupos químicos a los que está unido el

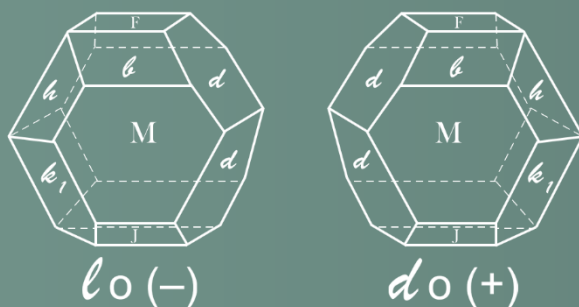


Figura 1. Así fue como Pasteur describió a los cristales enantiomorfos que aisló por resolución mecánica. Se dice que Pasteur fue muy afortunado a encontrar cristales enantiomorfos, ya que un evento así es poco probable de ser presenciado.

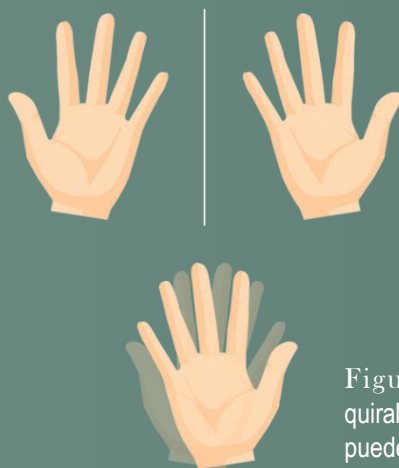


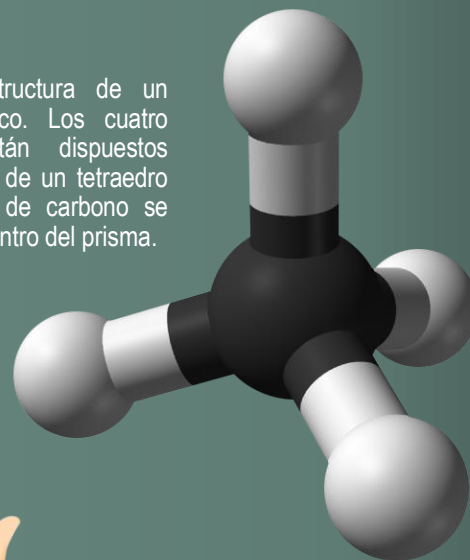
Figura 3. Las manos son cuerpos quirales. La mano izquierda no se puede superponer a la derecha.

átomo de carbono, se dirigen hacia los vértices de un tetraedro (carbono tetraédrico), con el carbono en el centro del mismo, entonces la molécula es asimétrica (Figura 2). La estructura de un carbono tetraédrico hizo considerar y representar a las moléculas en tres dimensiones espaciales y no en dos dimensiones. Esta innovación dio lugar a la estereoquímica.

La estereoquímica estudia la distribución espacial de los átomos que forman una molécula y el cómo esto va afectar las propiedades y reactividad de dichas moléculas. Para introducimos en el tema, usaremos nuestras manos como ejemplo, ya que son imágenes especulares o de espejo, es decir, que no se pueden superponer sobre su imagen reflejada (Figura 3). A esta propiedad se le llama quiralidad, que proviene del griego *cheir*, que significa “mano”.

Pero ¿cómo se aplica esta propiedad en química? Usemos como ejemplo un carbono con hibridación sp^3 , o sea, un carbono que puede tener hasta cuatro sustituyentes diferentes. Pensemos en dos moléculas: CH_3Cl y $CHClFN$. Cuando se

Figura 2. Estructura de un carbono tetraédrico. Los cuatro sustituyentes están dispuestos hacia los vértices de un tetraedro donde el núcleo de carbono se encuentra en el centro del prisma.



genera la imagen especular de CH_3Cl , observamos que son idénticas porque se pueden superponer entre ellas, por lo tanto no tienen quiralidad (Figura 4a). En cambio la molécula $CHClFN$ no es idéntica a su imagen especular, ya que por más que se rote y trate de superponerse con alguno de los sustituyentes, podrá coincidir con uno, pero con los demás no. A este tipo de moléculas se les conoce como enantiómeros (Figura 4b).

La quiralidad se debe a que el átomo de carbono (el cual se nombra como un centro estereogénico) tiene cuatro sustituyentes diferentes; es la propiedad más común, pero no la única. Cabe mencionar que la quiralidad no es propia del carbono, puede estar en otro tipo de átomos y moléculas siempre y cuando éstos no cumplan algún elemento de simetría. Los elementos de simetría son operadores geométricos (no algebraicos) que producen operaciones de simetría relativas a una recta, un plano o un punto interiores a un objeto. Cada elemento de simetría puede generar una o más operaciones de simetría. Los elementos de simetría molecular son: a) Ejes

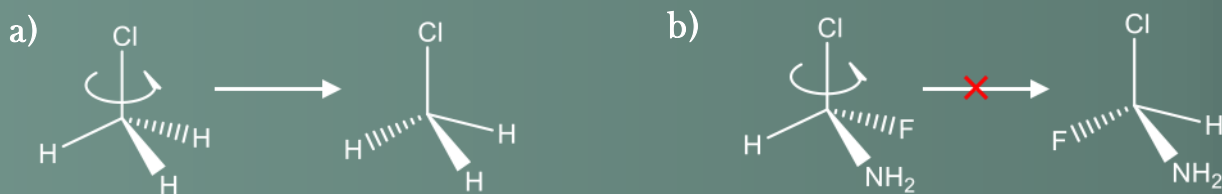


Figura 4. **a)** Las imágenes especulares del CH_3Cl corresponden al mismo compuesto ya que se generan al girar la molécula sobre el eje de uno de los enlaces. **b)** Las imágenes especulares del CHClFNH_2 no corresponden al mismo compuesto ningún movimiento hace que coincidan los sustituyentes.



Figura 5. Representación gráfica de los isómeros estructurales con la fórmula C_5H_{12} . a) Pentano. b) 2-metilbutano.

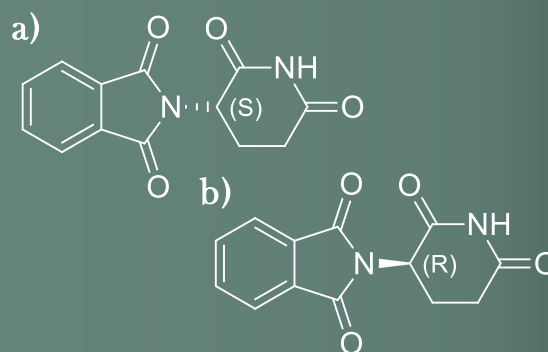


Figura 6. Talidomida. a) *(S)*-talidomida. b) *(R)*-talidomida

de rotación propia, C_n ; b) Planos de simetría, σ : b-i) horizontales, σ_h (perpendiculares al eje de rotación propia de mayor índice), b-ii) verticales (contienen al eje de rotación propia de mayor índice): b-II-I) verticales, σ_v (contienen mayor número de átomos de la molécula), b-II-II) diédricos, σ_d (contienen un número mínimo de átomos de la molécula), c) Centro de inversión, i , d) Ejes de rotación impropia, S_n .

Para entender un poco más de la estereoquímica, necesitamos definir el siguiente concepto: isómero. Un isómero es aquella molécula que tiene la misma fórmula pero diferente estructura. Se clasifican en isómeros estructurales y estereoisómeros. En los isómeros estructurales, los átomos se encuentran enlazados en diferente orden y a su vez se pueden clasificar en isómeros de cadena, posición y función. Tenemos la siguiente fórmula: C_5H_{12} , que puede referirse al pentano si es una estructura lineal (figura 2a) o al 2-metilbutano, que presenta una ramificación (figura 2b). Los estereoisómeros tienen todos los enlaces idénticos y se diferencian por la disposición espacial de los grupos que puede

ocasionar dos estereoisómeros que van a tener propiedades y reactividad distinta. Por lo tanto, los estereoisómeros pueden ser enantiómeros si tienen imagen especular; pero si no es el caso, se van a clasificar como diastereómeros.

Como mencionamos antes, la quiralidad importa más allá de la química. El caso más representativo en cuanto a medicina, es el causado por la talidomida, un fármaco sintetizado entre 1957 y 1963 en Alemania, utilizado como sedante y calmante de las náuseas durante los primeros meses del embarazo. Sin causar efectos secundarios en la madre, la talidomida afectaba a los fetos causando malformaciones, focomelia, específicamente. Se descubrió que la formulación estaba compuesta de los dos enantiómeros de la molécula. La forma *R* producía el efecto sedante buscado, mientras que la forma *S*, producía los efectos teratogénicos en los fetos. Hasta antes de este evento muchos consideraban que el fenómeno de la quiralidad era una curiosidad de la estructura de la materia, después, se supo que tenía grandes implicaciones en las actividades humanas.

Catalisis

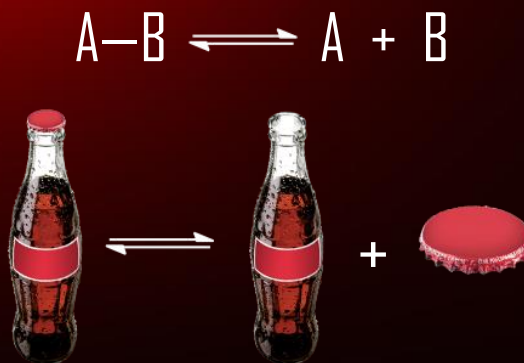
Y CÓMO QUITARLE LA CORCHOLATA A UNA BOTELLA DE REFRESCO

Por Domingo Rivera



Abrir una botella de refresco es un buen ejemplo para ilustrar el concepto de catálisis en una reacción química. La analogía podría hacerse de la siguiente forma: supongamos que deseamos llevar a cabo la ruptura del enlace que mantiene unidos a dos grupos funcionales A y B; dichos grupos funcionales podrían ser la botella (A) y la corcholata (B) que unidas forman a una botella tapada llena de refresco (AB). La ecuación química para dicho proceso quedaría como en el Esquema 1.

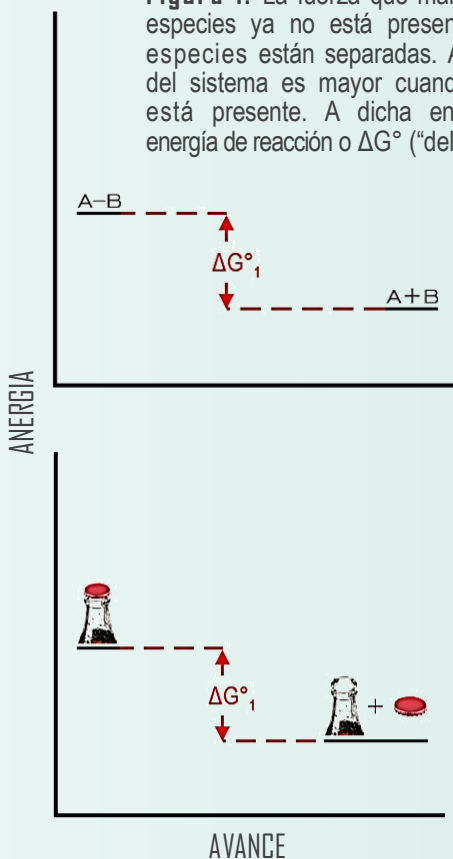
Como bien sabemos, existe una fuerza –energía– que mantiene unidas a las especies antes mencionadas. En el caso de los dos grupos funcionales, dicha fuerza es la energía de enlace y en el caso de la botella de refresco tapada, es la presión de la tapa contra la boca de la botella.



Esquema 1. El enlace entre dos grupos funcionales A y B podría ejemplificarse con la unión de una corcholata a una botella de refresco.

En ambos casos, para llegar al resultado de tener a las especies separadas, fue necesario vencer, disipar o disminuir la fuerza que las mantenía unidas; dichas especies separadas carecen de la energía que mantenía a esa fuerza de unión. Esto se ilustra en una gráfica donde se mida la energía del sistema conforme avanza un proceso (Figura 1).

Figura 1. La fuerza que mantiene unidas a dos especies ya no está presente cuando dichas especies están separadas. Así, la energía total del sistema es mayor cuando dicha fuerza sí está presente. A dicha energía se le llama energía de reacción o ΔG° ("delta ge" de reacción).



Hasta ahora todo parece lógico y observable, sin embargo, al considerar las afirmaciones del párrafo anterior, se podría pensar que no importa el medio o el mecanismo elegido, de todas formas se llegará al resultado de tener a las especies separadas. La teoría termodinámica afirma que, de hecho, el proceso ocurrirá sin importar lo que se haga –ya que todos los procesos tienden a la espontaneidad y dicha espontaneidad es perder energía–. Así, por ejemplo, podríamos esperar a que el enlace entre los dos grupos funcionales se vaya debilitando y desaparezca –o que la corcholata pierda fuerza de presión y se desprenda de la botella– sin embargo estos eventos espontáneos pueden tardar en ocurrir mucho tiempo y no podrían ni medirse, ni usarse de una forma práctica.

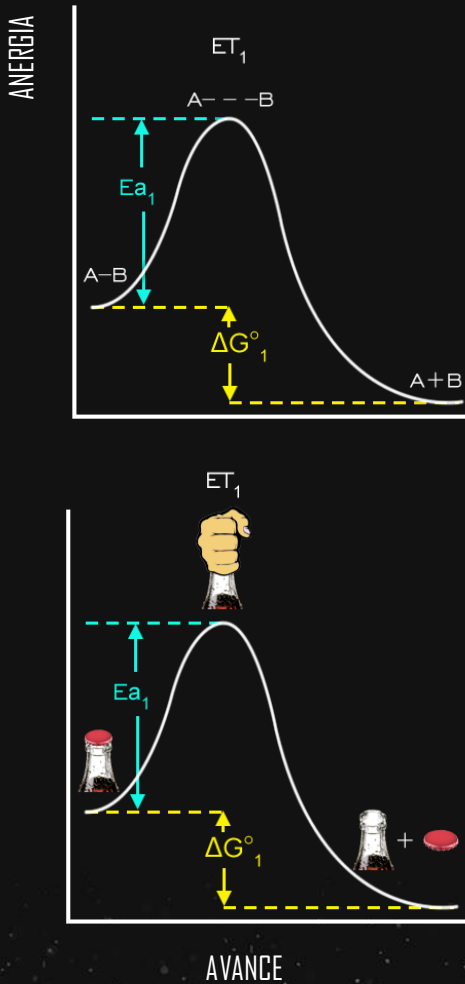
Una segunda opción podría ser imprimirle al sistema una energía mayor a la que lo mantiene en el estado de unión (energía de activación; Figura 2). En el caso de los dos grupos funcionales enlazados, dicha energía podría ser el calentamiento, la irradiación y en algunos casos la disolución en un medio apropiado. Para abrir la botella dicha energía se podría imprimir tratando de abrirla con la mano, con la mandíbula, con unas pinzas o contra un dispositivo improvisado. En ambos casos, seguramente los métodos y dispositivos utilizados llevarían al resultado deseado –el enlace roto y la botella destapada– pero al emplearlos se estaría suministrando gran cantidad de energía y seguramente la eficiencia del proceso sería baja ya que ninguno de los dispositivos o métodos elegidos están especialmente acondicionados para llevar a cabo el proceso.

Cabe destacar que al alcanzar la energía de activación se cree que se forma una especie química momentánea, intermedia entre la especie de la que proviene y las especies que pretende formar, es decir, no es ni la especie enlazada (A—B) ni las especies no enlazadas (A + B), sino un intermedio entre ambas (A- - -B). A esta especie se le conoce como el Estado de Transición (ET). De hecho, la energía de activación que se suministra al sistema debe ser tal que alcance la energía del ET. Así, los inconvenientes de emplear los dispositivos o métodos expuestos en el párrafo anterior son que no alcanzan o se ajustan necesariamente al ET y esa es la razón por la que un proceso genera productos alternos, productos de desecho, bajos rendimientos y tiempos prolongados de reacción, entre otros.

Con lo que hemos comentado hasta ahora, seguro todos ya están ideando la forma más eficaz de llevar a cabo los procesos que estamos estudiando. Para el proceso de retirar la corcholata de la botella lo más obvio es emplear un destapador, y siguiendo con nuestra analogía con la ruptura de un enlace químico, nos preguntamos si existirá un dispositivo que también facilite este segundo proceso. La respuesta es sí, y dicho dispositivo es un **catalizador**.

Un catalizador es un dispositivo especialmente capaz de alcanzar el ET con un gasto energético menor al que se requeriría con un suministro de energía "normal". En el caso de la botella tapada, el destapador está especialmente diseñado para llevar a cabo el proceso difícil de forma rápida y eficiente. En el caso de una ruptura –o formación– de un enlace, un catalizador lleva al sistema al ET a través de intermedios reactivos en los que se ha disipado la densidad electrónica, se ha generado un precursor que potencialmente generará productos estables o bien estabilizando al ET en una cavidad molecular que lo prepara para la transformación (enzimas).

Figura 2. Las dos especies se pueden separar si se les aplica una cantidad de energía tal que disipe o venza a la fuerza que las mantiene unidas. Dicha energía se conoce como energía de activación (E_a) y es la cantidad de energía necesaria para promover una transformación.



Además de disminuir y canalizar apropiadamente la energía utilizada en el proceso, la catálisis da como resultado una aceleración notable del mismo –la enzima anhidrasa carbónica puede hidratar 106 moléculas de CO_2 por segundo, unas 107 veces más rápido que la reacción no catalizada–. Desde el punto de vista energético, la energía de activación para llevar a cabo las transformaciones disminuye debido a que el catalizador es quien orquesta la transformación a través de dos ET y un intermedio (Figura 3). La transformación catalizada transcurre a través de una nueva ruta en la que igualmente es necesario alcanzar una energía de activación para activar el reconocimiento del catalizador, esta nueva especie en muchos casos es estable, aunque no tan estable como los productos correspondientes. Es bueno notar que el resultado final del proceso es el mismo que el que se obtendría sin catálisis y que el catalizador se recupera tal cual y que podría iniciar una nueva catálisis. Para ilustrar este fenómeno con nuestra analogía de la botella de refresco y pensando que el catalizador es el destapador, podríamos decir que el paso difícil del proceso es el doblar la corcholata. La mayoría de los textos que explican este fenómeno afirman que un catalizador se adapta perfectamente a los sustratos, sin embargo, pensar que eso sucede es una forma parcial de entender el fenómeno, ya que un dispositivo que se acopla perfectamente a una corcholata, probablemente no la podría doblar, en cambio, el destapador no necesariamente funciona para adaptarse a la corcholata, sino que está especializado en doblarla.



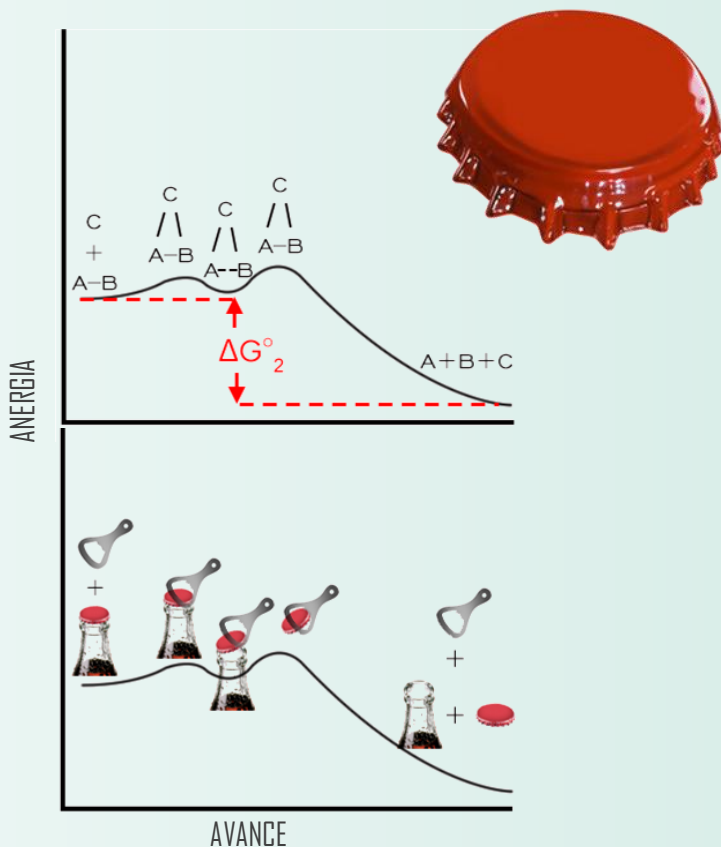


Figura 3. El mecanismo a través del que trabaja un catalizador es estabilizando el paso complicado de un proceso, en estos casos, la ruptura de un enlace o la apertura de una botella. C = catalizador.

Históricamente el concepto de catálisis se desarrolló durante decenas de años gracias a las contribuciones de Fulhame, Berzelius, Faraday, Davy, Böbereiner, Dulong, Thénard, Phillips, Ostwald, Hendy, Willhelmy, Kuhlmann, Buchner y experimentos relacionados de catálisis heterogénea, reacciones de oxidación en superficies de platino, hidrólisis de esteres, síntesis de etileno a partir de alcohol.

La primera patente para la fabricación de ácido sulfúrico y el desarrollo de una lámpara minera por parte de Humphry Davy mostraron el uso práctico de los catalizadores.

En 1794 Elizabeth Fulhame publicó en *An Essay on Combustion*, la siguiente frase:

“...para mostrar que el hidrógeno del agua es la única sustancia que restaura cuerpos oxigenados a su estado combustible; y que esa agua es la única fuente de oxígeno, el cual oxigena cuerpos combustibles”.

Esta frase es una de las primeras evidencias documentadas de un proceso catalítico. Se dice que Fulhame pretendía oxidar telas –una especie de técnica de teñido– con metales pesados como oro, plata y otros, bajo la influencia de la luz, pero su condición de no tener estudios formales en ciencia y el hecho de ser mujer limitaron la credibilidad de su trabajo. Ella estaba convencida de que el agua estaba involucrada en reacciones de oxidación y reducción.

Más adelante, en 1835 Jöns Jakob Berzelius (1779-1848) encontró que varias observaciones aisladas de investigadores del siglo XIX podrían explicarse a la luz de lo que él llamó “poder catalítico” o catálisis (del griego kata, totalmente, y lyein, soltar), que como él mismo lo definió, se trataba de la habilidad de las sustancias de “despertar afinidades que están despiertas a una temperatura dada...”

Después de la publicación correspondiente de Berzelius, el uso de la palabra “catálisis” se popularizó rápidamente pero no se usaba la de “catalizador” sino que se empleaba el término “sustancia de contacto”, término sugerido en 1842 por Eilhardt Mitscherlich (1794-1863). El término “catalizador” fue propuesto en 1885 por Henry E. Armstrong (1848-1937). Este nuevo concepto explicaba la observación de Kirchhof de que el almidón se puede transformar en azúcar en presencia de un ácido, los estudios de Thénard de descomposición de hidrógeno o la del amoníaco cuando se hacía pasar por un tubo de porcelana al rojo vivo pero, solo en presencia de hierro, cobre, plata, oro o platino; y el descubrimiento de Davy de que el etanol se puede convertir en ácido acético, además de los experimentos de Priestley, Döbereiner, Dulong, Payen y Persos.

Contribuciones significativas a la oxidación catalítica fueron realizadas por William Henry (el formulador de la Ley de Henry), sin embargo, fue Döbereiner (formulador de la Regla de las Triadas) fue el primero en describir el uso de platino en la oxidación de alcohol a ácido acético. Y en 1823 hizo pasar un haz de gas oxihidrógeno sobre platino y encontró que se combinaba además de que el platino se calentaba. Días después pasó hidrógeno sobre el platino en aire, resultando en una reacción y una flama, fue así que se descubrió la primera lámpara. A través de correspondencia Faraday pudo reproducir estos resultados afirmando que “todos los químicos estarían contentos de conocer esos resultados”; Faraday escribió:

“En dos publicaciones de Dulong y Thénard, estos filósofos mostraron que la elevación de la temperatura favorece la acción, pero no altera su carácter (del platino). El platino filamentosamente incandescente de Sir Humphry Davy generó el mismo fenómeno que la platina esponjosa de Dö’. Mostraron que todos los metales tienen este poder en mayor o menor grado y que también está presente en cuerpos como el carbón, pómez, porcelana, vidrio, roca cristalina, etc., cuando sus temperaturas se elevan.”

Fue entonces que el italiano Fusinieri, el primero en intentar una discusión teórica de los experimentos de Döbereiner y Davy. Proponiendo que la combinación de éter en el platino ocurría con la flama, el cual debe ser observado como luz y que las láminas concretas se las sustancias combustibles se podían observar a simple vista y que desaparecían con el calentamiento.

Ya para 1831 Peregrine Phillips reclamó una patente británica (No. 6069) para las "Mejoras y Manufactura de Ácido Sulfúrico comúnmente llamado Aceite de Vitriol". Mientras que en 1838 C. F. Juhlmann reportó la obtención de ácido nítrico a través de la oxidación de amoníaco sobre platino.

En 1833 Mitscherlich y Berzelius resumieron las reacciones que ocurren por "contacto". Así, se incluyeron la formación de éter, la oxidación de alcohol a ácido acético, la fermentación de azúcar y la formación de etileno a partir de alcohol por calentamiento. A pesar de que Berzelius no realizó investigaciones en catálisis (investigó el fenómeno de isomerismo), fue él quien dio el nombre de "fuerza catalítica" a este fenómeno, y reconoció que se manifiesta mayormente en organismos vivos. Liebing, quien mantenía correspondencia con Berzelius, sugirió que la función de un catalizador era convertir un tipo de inercia (de inerte) presentada por una sustancia inestable tiene la capacidad de experimentar cambios químicos y en acelerar procesos que por sí mismos son lentos. Liebing criticó las ideas de Berzelius e indicó que la creación de una "fuerza" y la palabra catálisis serían perjudiciales para la investigación futura.

Inicialmente la relación del concepto de catálisis y velocidad de reacción fue controversial, sin embargo, los trabajos de Wilhelmy acerca de la hidrólisis ácida de azúcar de caña para generar dextrosa y levulosa mostraron que la velocidad de reacción era proporcional a la concentración de azúcar presente. No obstante, fue Ostwald (1853-1932; Premio Nobel 1909) quién reclamara haber introducido el concepto de velocidad de reacción como un criterio de catálisis desde 1888, y que un catalizador debería ser clasificado como un acelerador (o inhibidor) de una reacción que ya había iniciado, en contraste con la idea de que es el catalizador el que inicia la reacción. Ostwald propuso durante su extensa carrera varias definiciones para catálisis, todas las cuales se corresponden entre sí. Así:*

1895 – *"Cualquier sustancia que altera la velocidad de una reacción química sin modificar los factores energéticos de la reacción"*

1902 – *Un catalizador es una sustancia que altera la velocidad de una reacción química sin aparecer en el producto final de la reacción.*

1902 – *Un catalizador es una sustancia que cambia la velocidad de una reacción sin ser cambiado el mismo en el proceso.*

Para 1901, Ostwald señaló que las reacciones catalizadas pueden pertenecer a una de cuatro categorías distintas: 1) Cristalización a partir de soluciones supersaturadas llevadas a cabo por la siembra de polvo o de un cristal; 2) Catálisis homogénea; 3) Catálisis heterogénea o de superficies; 4) Catálisis enzimática o biocatálisis. A Ostwald debemos el término y el concepto de "autocatálisis" para reacciones catalizadas por sus propios productos y que por tanto ganan rapidez conforme proceden (la hidrólisis ácida de ésteres es un ejemplo); también el de inhibidor, para reacciones que disminuyen la velocidad de una reacción.

Asimismo, la formulación de la teoría de la disociación catalítica en 1987, por Svante Arrhenius (1859-1927) fue un gran avance para la teoría catalítica. Antes de ella no se concebía que los iones libres, como H^+ y OH^- , pudieran estar en solución y que pudieran llevar a cabo catálisis de reacciones.

Para el caso de procesos biológicos, fue Berzelius quién asoció la fuerza catalítica en éstos, no obstante, fue Buchner quien en 1897 demostró que las fermentaciones pueden ocurrir fuera de una célula y que éstas eran debidas a los componentes catalíticos de contienen, las enzimas.**

Sin temor a equivocarme, buena parte de la química y su historia podrían abordarse examinando el concepto de catálisis, una de las 20 teorías que construyeron a la química.

BIBLIOGRAFÍA

- a) Laidler, K.; Meiser, J. Físicoquímica, Grupo Editorial Patria, México **1997**.
- Roberts, M. Birth of the catalytic concept (1800-1900) *Catalysis Letters*, **2000**, 67, 1-4.
<https://doi.org/10.1023/A:1016622806065>
- Laidler, K.; Cornish-Bowden, A. Elizabeth Fulhame and the Discovery of Catalysis: 100 Years Before Buchner, en *New Beer in an Old Bottle: Eduard Buchner and the Growth of Biochemical Knowledge*, pp. 123–126, ed. A. Cornish-Bowden, Universitat de València, Valencia, España, **1997**.
- Cornish-bowden, A. Two centuries of catalysis *Biosci.*, **1998**, 23, 87-92.

* Actualmente la definición de catalizador y de catálisis sigue siendo controvertida. No todos aceptan que un catalizador no inicia una reacción, o que un catalizador no necesariamente debería utilizarse en pequeñas cantidades.

** El término *enzima* "en levadura" fue acuñado por Khüene en 1876 al estudiar los componentes de una levadura. En 1878, Traube reconoció a esos componentes como sustancias químicas formales responsables de la catálisis en células.

LA UTILIDAD DE LA ELECTRONEGATIVIDAD

La química está basada en muchos principio y teorías, unos más complejos que otros, sin embargo hay un concepto que es fundamental para entender el por qué de la formación de moléculas, y aunque en su explicación puede ser complejo, en la aplicación es muy simple de entender y eso lo ha hecho la pieza clave para que todos los químicos la utilicen casi como un instinto en el momento de pensar en interacciones entre átomos, nos referimos a *La Electronegatividad*, ese concepto tan utilizado pero que además es pieza fundamental para entender muchas aplicaciones de los materiales que nos rodean. Aquí describiremos un par de ejemplos de cómo la electronegatividad ha ayudado a construir el mundo actual.

Por
Carla Cervantes y
Angel Contreras

Una de las pruebas más extenuantes en lo deportivo siempre ha sido el tour de Francia, competencia de ciclismo en la cual cada competidor recorre aproximadamente 3500 km en 21 días de competencia. Pero, ¿cómo es que se ha podido llevar a este desempeño tan ejemplar a los atletas? La respuesta nuevamente es la ciencia detrás de todas las actividades. Aquí les diremos cómo la electronegatividad como concepto ha ayudado a crear los artilugios que se requieren para lograr dicha hazaña.

Pensemos en los metales. El costo de los metales antes de ser procesados varía dependiendo de muchos factores, incluyendo, su abundancia y disponibilidad, las aplicaciones en que se utiliza, la forma en que se encuentran en su estado natural, ya que no siempre se encuentran como elementos puros sino en forma de otros compuestos como óxidos de metales, o en forma de sales, y por supuesto depende mucho de la actividad económica y estabilidad del mercado. Hay metales como el Titanio que han llegado a costar hasta USD\$17,000 por tonelada métrica y actualmente su costo se ha reducido a USD\$4,000.

La aplicación de los metales depende de los diferentes compuestos que un mismo metal puede formar. Retomando el ejemplo del Titanio, éste puede usarse en su forma metálica para fabricar aleaciones de alto desempeño, las cuales brindan ventajas sobre otras aleaciones como una baja densidad, que permite crear objetos livianos con una alta resistencia específica y a la corrosión.¹ El Titanio fue usado por su baja densidad para la fabricación de las bicicletas ganadoras hace 20 años por Lance Armstrong, por la resistencia y el bajo peso; sin embargo, posteriormente le superó la fibra de carbono, pero se ha seguido usando un recubrimiento de óxido de titanio para mejorar su desempeño ante elevadas temperaturas, así en 2017, el equipo "Sky" usó bicicletas Castelli en el Tour de Francia recubiertas con dióxido de titanio.^{1a}

El Óxido de Titanio (TiO_2) es usado ampliamente, en la industria cosmética, farmacéutica, plásticos, pinturas o esmaltes y tintes por la característica de este compuesto de ser de color blanco intenso y opaco. En la síntesis química, el uso de compuestos de coordinación de Titanio es útil para llevar a cabo reacciones muy específicas para generar por ejemplo, Productos Activos Farmacéuticos como el Esomeprazol, que es un fármaco altamente consumido; en su fabricación utiliza Isopropóxido de Titanio.² O qué dicen de las aplicaciones de las sales y óxidos de Titanio para sensores de oxígeno usando la ventaja de lo que se denomina vacancias en la red cristalina para crear diferencias de potencial que se traducen en una señal de falta o exceso de oxígeno.

Entonces, un solo elemento puede formar muchos compuestos, y esa característica está relacionada con uno de los conceptos más útiles de la química: *la Electronegatividad*, y es que sin este concepto sería muy difícil predecir y entender la capacidad de formar compuestos de cada uno de los elementos de la tabla periódica.

El primero en introducir el concepto de electronegatividad fue Linus Pauling, en 1932 y la definió como "la capacidad de un átomo de atraer electrones hacia sí".³ Pauling asignó el valor de 4.0 al Flúor, el elemento más electronegativo, y dio valores relativos de electronegatividad a los demás elementos. Los valores de electronegatividad de Pauling están entre ($\chi = 4.0$) para el elemento más electronegativo que es el Flúor, y ($\chi = 0.7$) para el elemento menos electronegativo que es el Francio.⁴ La electronegatividad de los elementos es una propiedad que está ligada a las características de la capa electrónica, en especial a la capa más externa, lo que se refleja en cómo los átomos del elemento interactúan en los enlaces con otros elementos. Los elementos en un enlace que tienen electronegatividades muy diferentes, tiende a formar un enlace iónico, y si por el contrario, las diferencias en electronegatividad son muy pequeñas, tiende a formar un enlace covalente no polar.⁵

Posteriormente Mulliken en 1934, la definió como el promedio entre la energía de ionización y la afinidad electrónica de un átomo.⁶ Esta definición ha sido muy usada en las últimas décadas ya que la definición involucra parámetros que pueden ser medidos en los elementos neutros y en sus diferentes estados de valencia. Los valores de Pauling no consideran una variación en la electronegatividad cuando el mismo elemento tiene diferentes valencias por lo que la definición de Mulliken presenta mayores ventajas a este respecto. Posteriormente, Parr y Pearson propusieron *la dureza absoluta*, definida como la mitad de la diferencia entre la energía de ionización y la afinidad electrónica,⁷ concepto que ayudó a comprender la naturaleza de los enlaces químicos.

La electronegatividad es uno de los conceptos más amplios de la química, ya que aplica para todas las moléculas que existen o existirán, brindando la capacidad de predecir cómo dos átomos van a interactuar, sin importar si son moléculas orgánicas, inorgánicas, de coordinación, polímeros, etc., ya sea de manera intramolecular o intermolecular. Entonces, si por definición, un átomo más electronegativo va a tener la capacidad de atraer electrones de un átomo menos electronegativo, podremos predecir la reactividad entre esos dos átomos; es por eso que en muchos compuestos inorgánicos resultan de la unión entre un *metal* con un *no metal*, mientras que en química orgánica siempre vemos la reactividad entre grupos funcionales electrodonadores y grupos electroattractores, o incluso las reacciones ácido-base funcionan con el principio de electronegatividad. Todo esto es muy práctico para las aplicaciones como el modelado de nuevos fármacos, ya que la actividad farmacológica está relacionada con la interacción de los átomos que conforman el fármaco y su reactividad con los átomos de las moléculas en el cuerpo humano. Así, los valores de electronegatividad junto con la topología de las moléculas pueden ser usados para predicciones y análisis moleculares por medio de programas computacionales.⁸

Como muestra, el diseño de fármacos generalmente inicia con la identificación de una macromolécula particular (generalmente una proteína), implicada en una enfermedad o patología. La investigación posterior revela un sitio activo o receptor en la molécula que responde a una molécula (ligando) que funciona como un transmisor, un sustrato o un inhibidor. Posteriormente se identifica a este ligando como potencial arquetipo para el diseño de un fármaco clínicamente útil.⁸ En este diseño de fármacos, lo que sucede entre el fármaco y el sitio receptor implicado en la patología tienen que tener una reactividad o una capacidad de interactuar, y ésta al final está definida por un valor de electronegatividad, así los químicos encargados de este diseño colocan los grupos funcionales más adecuados para llevar a cabo esta interacción.

Como concepto, la Electronegatividad nos ha permitido predecir y diseñar moléculas que permiten dar solución a los retos que enfrentan las personas. Entonces, para lograr que el ciclista alcance 3500 km en 21 días con un alto desempeño con temperaturas que llegan en ocasiones hasta 50°C, lo que requerimos son bicicletas ligeras y con resistencia a temperaturas como las que nos da el Óxido de Titanio; fármacos usados como recuperadores y suplementos alimenticios, los cuales fueron fabricados utilizando compuestos Óxido de Titanio como excipientes, y blanqueadores tan utilizados hasta en las pastas dentífricas y otros artículos de alto consumo. O el Titanio utilizado como catalizador en la síntesis de fármacos, y los instrumentos capaces de medir el consumo de oxígeno, los cuales utilizan cerámicos de Titanio.

Todos estos productos que hoy utilizamos como cotidianos, son sintetizados artificialmente y en cada uno de ellos hay un trabajo científico basado en conceptos como la *Electronegatividad*, esta capacidad de darle valor agregado a un material, es el que determina su costo real, en el caso de Titanio, su valor está relacionado directamente en las aplicaciones, ya que como ahora lo sabemos, el Titanio pueden formar materiales más allá de la forma metálica que comúnmente nos imaginamos y eso está dado por su capacidad para interactuar con muchos átomos en formas distintas.

BIBLIOGRAFÍA

1. a) <https://www.ucm.es/atlasmetalografico/aleaciones-de-titanio>, b) <https://tdma.info/how-titanium-dioxide-is-saving-cyclists-from-the-sun/>
2. Vardanyan, R., & Hruby, V. (2016). Synthesis of Best-Seller Drugs, Chapter 37- Proton Pump Inhibitors, *Academic Press*, 765-781
3. Pauling, L. (1932). The nature of the chemical bond. IV. The energy of single bonds and the relative electronegativity of atoms. *Journal of the American Chemical Society*, 54(9), 3570-3582.
4. Housecroft, Catherine E. et. al. "Inorganic Chemistry" 3rd Edition. Pearson Education Limited 2008. Chapter 2.5 "Electronegativity Values" pgs. 42-44 citado por [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_\(Physical_and_Theoretical_Chemistry\)/Physical_Properties_of_Matter/Atomic_and_Molecular_Properties/Electronegativity/Pauling_Electronegativity](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Physical_Properties_of_Matter/Atomic_and_Molecular_Properties/Electronegativity/Pauling_Electronegativity)
5. [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_\(Physical_and_Theoretical_Chemistry\)/Physical_Properties_of_Matter/Atomic_and_Molecular_Properties/Electronegativity/Pauling_Electronegativity](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Physical_Properties_of_Matter/Atomic_and_Molecular_Properties/Electronegativity/Pauling_Electronegativity)
6. Mulliken, R. S. (1934). A new electroaffinity scale; together with data on valence states and on valence ionization potentials and electron affinities. *The Journal of Chemical Physics*, 2(11), 782-793.
7. Parr, R. G., & Pearson, R. G. (1983). Absolute hardness: companion parameter to absolute electronegativity. *Journal of the American chemical society*, 105(26), 7512-7516.
8. Hall, L. H., Kier, L. B., & Hall, L. M. (2007). Topological Quantitative Structure–Activity Relationship Applications: Structure Information Representation in Drug Discovery. pag. 540.

Para saber más...

1. <https://www.cyclingweekly.com/news/racing/tour-de-france/tour-de-france-bikes-131646>
2. <https://www.youtube.com/watch?v=UGns8S-kDNg>
3. <https://www.youtube.com/watch?v=pk-0XV1Ro8o>

EQUILIBRIO QUÍMICO



Por Antonio Ruiz

Todos los procesos químicos evolucionan desde los reactivos hasta la formación de productos a una determinada velocidad hasta que la reacción se detiene, es decir, dejan de registrarse cambios netos en las concentraciones tanto de reactivos como de productos. Llegado ese instante, lo que en realidad ocurre en el proceso es que la velocidad de formación de los productos es igual a la velocidad de descomposición de éstos para formar nuevamente los reactivos de los que proceden. Es decir, se llega a la formación de un estado de equilibrio dinámico en el que las concentraciones de todas las especies reaccionantes (reactivos y productos) permanecen constantes. Ese estado se conoce con el nombre de *Equilibrio Químico*.

Una reacción reversible puede proceder tanto hacia adelante como hacia atrás. La doble flecha incompleta –o de media cabeza– que usamos al escribir reacciones reversibles, \rightleftharpoons , es un buen recordatorio visual de que las reacciones pueden ir ya sea hacia adelante para generar productos, o hacia atrás para crear reactivos. Un ejemplo de una reacción reversible es la formación de dióxido de nitrógeno, NO_2 a partir de tetraóxido de dinitrógeno N_2O_4 :



Es importante recordar que aunque las concentraciones son constantes en el equilibrio, la reacción no se ha detenido. Y es por eso que a este estado también se le llama equilibrio dinámico. También es importante mencionar que en el equilibrio las transformaciones no se encuentran, ni a la mitad del consumo de reactivos, ni al 100%, de hecho, el avance que se registre en una transformación depende precisamente del estado de equilibrio de la misma.

La forma más antigua de explicar por qué los compuestos químicos reaccionan se basaba en que las reacciones se debían a características de simpatía y antipatía entre sustancias, y podrían rastrearse a los principios de "amor y lucha" de Empédocles. La primera idea de afinidad como tal fue de Albertus Magnus quien introdujo el término que expresa la tendencia de las sustancias a reaccionar. Este concepto establece que, *cuanto mayor es la afinidad (semejanza, similitud o relación) entre dos productos químicos, mayor es la tendencia de estas sustancias a reaccionar*.

En los primeros años del siglo XVIII, Newton trató de abordar una explicación teórica sobre por qué algunas sustancias reaccionaban con otras. En la trigésima primera consulta de su libro *Óptica*, consideró que en química habría fuerzas similares a las gravitacionales. Estas las fuerzas se manifestarían solo a una distancia muy corta, y supuso que la extensión de esas fuerzas dependían del tipo de sustancias involucradas. Como consecuencia, algunos científicos trataron de dar cuenta de la medida de estas "afinidades electivas".

La determinación de las afinidades dio un orden relativo que explicaba la interpretación de las reacciones de desplazamiento. Por ejemplo, si una sustancia A reaccionó con otra sustancia BC, produciendo dos nuevas sustancias AB y C, se concluyó que la afinidad de A con B fue mayor que la de A con C. Este marco fue aplicable a las reacciones entre ácidos, bases y sales. Por lo tanto, un ácido reemplazó a otro si su afinidad sobre un la base fue mayor que la inicialmente combinada con la base. Otro campo de aplicación fue la interpretación de las reacciones de los metales en solución.

Claude Louis Berthollet, en su obra sobre la teoría de las afinidades químicas "Ensayo de Estática Química" de 1803, propuso una ley de proporciones indefinidas para las combinaciones químicas. Aunque esta ley fue rechazada, la idea de Berthollet de que la masa influye en el curso de las reacciones químicas fue posteriormente vindicada en la *Ley de Acción de Masas* de Guldberg y Waage. En su primer trabajo de 1864, tomaron en cuenta la mecánica como paradigma y se centraron en la medición de lo que era responsable de, como lo llamaron, las fuerzas químicas. Convencidos de que la química debería convertirse, como la mecánica, en una ciencia de las fuerzas y sus efectos, estos químicos noruegos encontraron que existía una relación constante entre las concentraciones de los productos y de los reactivos. Esta ley se denominó "Ley de acción de masas" y se puede enunciar así:

Para una reacción reversible en equilibrio químico, a una temperatura dada, se cumple que el producto de las concentraciones de los productos elevadas a los coeficientes estequiométricos dividido por el producto de las concentraciones de los reactivos elevadas a sus coeficientes estequiométricos es una constante.

A esta constante se la denominó constante de equilibrio K_c . Consideremos la siguiente reacción balanceada reversible:



Si conocemos las concentraciones molares de cada una de las especies de reacción (reactivos y productos) en el equilibrio, podemos encontrar el valor de K_c usando la relación:

$$K_c = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

Donde C y D son las concentraciones de los productos en el equilibrio; A y B las concentraciones de los reactivos en el equilibrio; a , b , c y d , son los coeficientes estequiométricos de la ecuación balanceada.

El nacimiento de la cinética química a menudo se considera que ocurrió en 1850, cuando el químico alemán Wilhelmy estudió cuantitativamente la tasa de inversión de sacarosa. El trabajo de Wilhelmy pasó desapercibido hasta que a Ostwald le llamó la atención. Otros científicos como Williamson, Berthelot y Saint Gilles, Guldberg, Waage, Hartcutt y Esson desarrollaron nuevos estudios cuantitativos de los factores sobre los cuales dependía la velocidad de reacción. Todas estas aportaciones a la matemática y la implementación de la cinética química constituyeron un hito importante en el desarrollo del concepto de equilibrio químico, ya que los químicos se dieron cuenta de la acción de masas como un factor importante en el resultado de las reacciones químicas.

En 1850, Williamson, estudiando las reacciones de eterificación incompletas, fue el primer científico en proponer un modelo submicroscópico para explicar el estado "estático" de equilibrio químico. No consideró este equilibrio como una situación en la que nada sucede, por el contrario, asumió que dos reacciones se ejecutan simultáneamente, cada una en sentido opuesto. Así, los "reactivos" y los "productos" se estaban formando y descomponiendo constantemente de manera que la cantidad de todas las sustancias involucradas permanezca constante.

LA PERTURBACIÓN DEL EQUILIBRIO

Las perturbaciones del estado de equilibrio químico por obra de una intervención exterior que modificase sus condiciones reclamaron la atención del químico francés Le Châtelier. Cuando una

reacción química ha alcanzado el estado de equilibrio químico, las concentraciones de reactivos y productos se mantienen inalteradas de forma indefinida si permanecen fijas las condiciones del sistema, pero si la modificación de alguna de ellas se modifica, el sistema evoluciona hacia un nuevo estado de equilibrio.

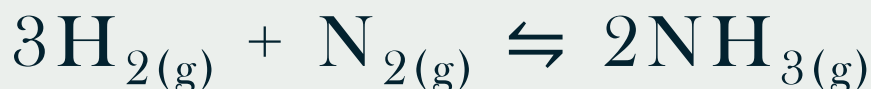
van't Hoff y Le Châtelier estudiaron la influencia que las variaciones de temperatura, de presión y de concentración ejercen sobre el equilibrio químico y observaron que si alguno de estos factores se modifica en un sentido, el sistema tiende a contrarrestar el efecto de esa modificación. Le Châtelier recogió estas observaciones en el *Principio de Desplazamiento del Equilibrio Químico* o *Principio de Le Châtelier*. Los factores que influyen la posición del equilibrio son variaciones en la presión, modificación de la temperatura y alteración en las concentraciones de las sustancias en equilibrio.

VARIACIÓN DE LA PRESIÓN

Un cambio en la presión sólo afecta al equilibrio si intervienen en la reacción sustancias gaseosas.

El aumento de presión desplaza el equilibrio en el sentido en el que exista un menor número de moles de sustancias gaseosas; hay que recordar que, según la ecuación de los gases ideales, la presión es directamente proporcional al número de moles.

El descenso de la presión desplaza el equilibrio hacia la formación de sustancias gaseosas. La obtención de amoníaco mediante el método Haber se basa en el siguiente equilibrio representado por la ecuación:

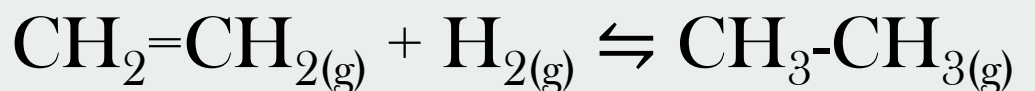


en los reactivos tenemos 4 moles de sustancias gaseosas mientras que en los productos del equilibrio solamente hay 2. Un aumento de la presión exterior desplaza el equilibrio hacia la formación de amoníaco pues en ese término hay un menor número de moles de sustancias gaseosas.

Una disminución de la presión exterior desplaza el equilibrio hacia la producción de una mayor cantidad de sustancias gaseosas.

MODIFICACIÓN DE LA TEMPERATURA

Un aumento de temperatura hace que el equilibrio se desplace en el sentido de absorción de calor. El descenso de la temperatura provoca que el equilibrio se desplace de tal manera que el sistema desprenda calor. La hidrogenación del eteno o etileno produce etano y se trata de una reacción exotérmica con una entalpía de reacción de -136 kJ/mol-



$$\Delta H = -136 \text{ KJ/mol}$$

La reacción inversa, la dehidrogenación del etano es, evidentemente una reacción endotérmica.

Si tras alcanzar el equilibrio se aumenta la temperatura, el sistema evolucionará en el sentido en que absorba calor; por tanto se desplazará hacia la izquierda en el sentido de la regeneración de etileno e hidrógeno, si se disminuye la temperatura, el sistema responderá desprendiendo calor y desplazándose hacia la formación de etano.

VARIACIÓN DE LA CONCENTRACIÓN

La proporción existente entre las concentraciones de las sustancias que intervienen en la reacción está determinada por la constante de equilibrio. Para que su valor permanezca constante, al modificar el valor de la concentración de una de las especies, necesariamente deben variar las concentraciones del resto de sustancias.

Al aumentar la concentración de una sustancia, el equilibrio evoluciona haciendo disminuir la cantidad presente de esta. La disminución de la concentración provoca el desplazamiento hacia la formación de esa sustancia.

BIBLIOGRAFÍA

1. Arquímedes, *Opera Archimedis Syracusani philosophi et mathematici ingeniosissimi*, Venturinum Ruffinellum, Venecia, **1543**.
2. Arquímedes, *Archimedis Syracusani philosophi ac geometrae excellentissimi Opera*, Basel, **1544**.
3. I. Newton, *Naturalis Philosophiae Principia Mathematica (Editio tertia)*, Regiae Societatis Typographos, Londini, **1726**.
4. Lanczos, C. *The variational principles of mechanics*, 4th ed., Dover Publications, New York, **1970**.
5. Idhe, A. J. *The Development of Modern Chemistry*, Dover Publications, New York, **1984**.
6. Thackray, A. W. *Atoms and powers: an essay on Newtonian matter-theory and the development of chemistry*, Cambridge University Press, Cambridge (Mass.), **1970**.
7. de la Llosa, P. *El espectro de Demócrito. Atomismo, disidencia y libertad de pensar en los orígenes de la ciencia moderna*, Ediciones del Serbal, Barcelona, **2000**.
8. Boyle, R. *Física, química y filosofía mecánica*, Alianza, Madrid, **1985**
9. Quèlez, J. *Un enfoque histórico para el desarrollo de equilibrio químico a través de la evolución del concepto de afinidad: algunas sugerencias educativas*, **2004**, vol. 5, págs. 69-87



CRIMINALÍSTICA

REVISTA QUIMIOFILIA
NO. 14

ABRIL 2020

Ivan the Terrible and His Son Ivan on 16 November 1581. Ilya Repin 1883 -1885.

Un breve repaso de personajes históricos nos permitirá entender la importancia de la electroquímica.



Antigüedad

Existen objetos cerámicos de la era

protohistórica (3000 años de antigüedad) encontrados en Italia, donde se observa la deposición de ciertos metales sobre otros. Los romanos conocían ya la deposición sin corriente eléctrica (*electroless*), pues hay testimonios de monedas de plomo o cobre recubiertas con oro o plata; éstas eran usadas por algunos tiranos para engañar en sus actividades comerciales.³



Charles-Augustin de Coulomb

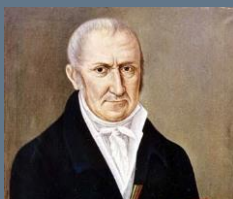
Físico. Junto con otros contemporáneos, en 1781 con su publicación de "La teoría electrostática", prepararon el terreno para la Electroquímica.⁴



Luigi Galvani

Anatomista y médico. Famoso por su experimento de las ancas de rana. Durante el siglo XVIII era el auge de las aplicaciones de la electricidad y el mundo se llenó de experimentos impresionantes.

Los científicos se planteaban la posibilidad de obtener electricidad a partir de animales como las anguilas, rayas eléctricas, el pez torpedo, etc. Galvani publica su "*De Viribus Electricitatis in Motu Musculari Commentarius*" en 1791, proponiendo que debería existir una sustancia "nervio-eléctrica" en todo ser viviente, dando lugar al "galvanismo o flujo galvánico", y a términos que actualmente se siguen empleando como la "corriente galvánica", "galvanostátos, galvanómetros", "celda galvánica", etcétera.⁵



Alessandro Volta

Físico. Entusiasmado con los experimentos de Galvani, Volta se propuso comprobarlos y profundizarlos y en pocos meses se desencantó al percatarse de ciertos errores en ellos, negando ro-

tundamente la teoría de la "electricidad animal" de su colega. Volta se enfocó en la experimentación exclusiva con metales, llegando a su obra cumbre de la pila de Volta, en 1800, que consistía en una serie de discos apilados de zinc y cobre separados con papel impregnado con salmuera.⁵



Humphry Davy

Químico. Con Volta y Faraday, se les considera los fundadores de la Electroquímica. Aisló el sodio y el potasio a partir de la electrólisis de sus sales fundidas y otros compuestos de metales alcalinotérreos.

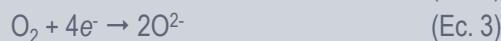
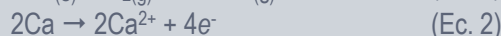
LA CONTRIBUCIÓN DE LA ELECTROQUÍMICA

Por Bernardo Gudiño

En términos básicos y simples, la Electroquímica es la rama de la química que estudia la relación entre la electricidad y las transformaciones de la materia, es decir las reacciones químicas que se dan en la interfase de un conductor eléctrico (llamado electrodo, que puede ser un metal o un semiconductor) y un conductor iónico (el electrolito) pudiendo ser una disolución y en algunos casos una sal fundida. La comprensión y aplicación de esta relación, ha provocado un gran impacto en el desarrollo científico y tecnológico. Un tercio de la industria química tiene sus bases en la Electroquímica.¹

La Electroquímica se puede entender considerando dos fenómenos: la electrólisis, la cual abarca las reacciones químicas producidas por acción de una corriente eléctrica (celda electrolítica). El segundo fenómeno es aquel que abarca reacciones químicas que generan una corriente eléctrica, este proceso se lleva a cabo en una celda o pila galvánica.²

Los procesos electroquímicos son reacciones de oxidación y reducción (redox). Una reacción redox se lleva a cabo por la transferencia de electrones, a diferencia de una reacción ácido-base en la que se transfieren protones. Consideremos la formación de óxido de calcio (CaO) a partir de calcio y oxígeno:²



El óxido de calcio (CaO) es un compuesto iónico formado por iones Ca^{2+} y O^{2-} . En este ejemplo, dos átomos de Ca transfieren cuatro electrones a dos átomos de O (Ec. 1). Es conveniente ver este proceso como dos etapas por separado, una en la que se pierden electrones de los átomos



Michael Faraday

Físico y químico. Con un carácter dócil y abnegado, Faraday es uno de los científicos más influyentes de la historia. Con una habilidad sorprendente para

la experimentación, su vida científica fue forjándose a través de muchas humillaciones y sacrificios, pues su incursión fue mayormente autodidacta y empírica. Por ello, no era visto a la par de la élite científica donde servía de asistente. Sus contribuciones son muchas en el campo de la física, pero su gran aportación a la química fue establecer en 1832 la Ley de la Electrólisis: la relación entre la carga eléctrica y la cantidad de materia electrolizada. Por lo que se le considera el "Padre de la Electroquímica". Con su Ley, se pudo establecer con más sustento la constante de Avogadro.⁶



John Daniel

Químico. Inventó en 1836 la primera celda electroquímica galvánica, mejorando la pila voltaica, sin la presencia de hidrógeno, y permitiendo así otro enfoque en la comprensión del proceso electroquímico.



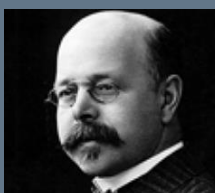
William Grove

Científico. Patentó en 1839 la primera celda de combustible, utilizada para "quemar" electroquímicamente al hidrógeno y producir electricidad.



George Leclanché

Ingeniero y científico. Desarrolló en 1866 la ingeniería de la primera batería no recargable de zinc-carbón con electrolito de dióxido de manganeso, utilizada hasta nuestros días.



Walther Nernst

En 1888 logró establecer el vínculo de la Electroquímica con la Termodinámica, al calcular la energía eléctrica involucrada en los procesos químicos de las pilas por medio de la f.e.m. (fuerza electromotriz) en un estado de equilibrio electroquímico a un flujo de corriente nulo. Bajo esta luz, postuló su valiosa Ecuación de Nernst, utilizada en todos los sistemas electroquímicos.

triz) en un estado de equilibrio electroquímico a un flujo de corriente nulo. Bajo esta luz, postuló su valiosa Ecuación de Nernst, utilizada en todos los sistemas electroquímicos.



Svante August Arrhenius

Originalmente físico y más tarde químico. Premio nobel de química en 1903 por la teoría de la disociación electrolítica a través de mediciones de conductividad eléctrica y postulados en Termodinámica.

de los átomos de Ca (Ec. 2) y otra donde los átomos de O los ganan (Ec. 3). Cada una de estas etapas se denomina semireacción y simbolizan los electrones transferidos en una reacción redox. La suma de las semirreacciones produce la reacción global. Así, el término reacción de oxidación se refiere a la semirreacción de pérdida de electrones; por otro lado, el término reacción de reducción, es la semirreacción que implica ganancia de electrones. En este caso, el Ca actúa como agente reductor, ya que cede electrones y el O como agente oxidante, que es quien los acepta.²

En el caso de un diseño electroquímico galvánico (espontáneo), si el agente oxidante se separa físicamente del agente reductor, la transferencia de electrones se puede llevar a cabo a través de un medio conductor externo (un alambre o un tubo). Conforme progresa la reacción, se establece un flujo de electrones constante que genera electricidad, la cual puede producir trabajo.²

Una celda electroquímica (Figura 1) es un dispositivo para generar electricidad mediante una reacción redox espontánea, esta celda se conoce como celda galvánica o voltaica.²

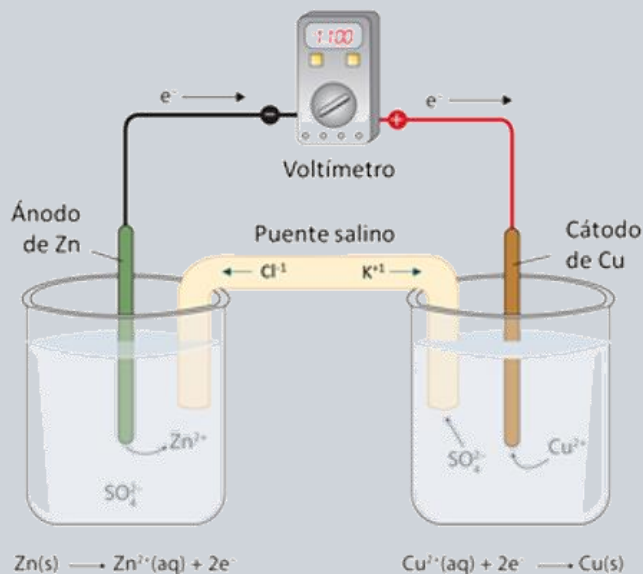


Figura 1. La celda electroquímica de Daniel. El puente salino (un tubo U invertido) contiene una disolución de KCl que proporciona un medio conductor eléctrico entre dos disoluciones. Los orificios del tubo en U se tapan con membranas semipermeables para evitar que la disolución de KCl fluya hacia los recipientes, al tiempo que permite el paso de aniones y cationes. Los electrones fluyen por afuera desde el electrodo de Zn (el ánodo: electrodo en el que se lleva a cabo la oxidación) hacia el electrodo de Cu (el cátodo: electrodo en el que se lleva a cabo la reducción). Los electrodos pueden ser de cualquier material que sea un conductor eléctrico, como metales, semiconductores. También se usa mucho el grafito debido a su conductividad y bajo costo.



Julius Tafel

Químico. Trabajó intensamente en electroquímica orgánica y en específico con la reacción de reordenamiento de acetoacetatos de etilo alquilados para formar hidrocarburos. Además, en 1905 estableció la ecuación fun-

damental para el estudio de la velocidad de reacción de los sistemas electroquímicos que relaciona la corriente con el sobrepotencial. También se le atribuye el descubrimiento del mecanismo catalítico de la evolución del hidrógeno (el mecanismo de Tafel), abriendo el paso a la electrocatálisis.



Johannes Nicolaus Brønsted y Thomas Martin Lowry

Químico y Físico respectivamente. Inspirados por los trabajos de Arrhenius, establecieron sus teorías de ácidos y bases en 1923, utilizando técnicas electroquímicas.



Jaroslav Heyrovský

Químico. Premio Nobel por la invención del primer sistema automatizado de análisis químico, con límites de detección muy bajos, denominado *polarografía*, técnica precursora de una de las herramientas fundamentales para todo electroquímico a partir

de 1924 de publicada su patente: la voltamperometría.



Arne Tiselius

Médico y biólogo. Premio nobel de química en 1948 por la invención de la electroforesis para la separación de las proteínas según su peso molecular y su interacción en un campo eléctrico, una contribución para el estudio de la bioquímica.



John B. Goodenough, M. Stanley Whittingham y Akira Yoshino

Premio nobel en 2019 por la invención y desarrollo de las baterías de ion litio.

En su corta vida, cerca de 240 años, la Electroquímica ha evolucionado velozmente y sus aplicaciones y contribuciones con otras disciplinas son muy variadas e importantes para la química actual. Como un breve listado de aplicaciones significativas, podemos mencionar:

En el área metalúrgica y metal-mecánica: recubrimiento de metales y acabados superficiales, obtención y refinamiento de metales, en la electrosíntesis: agentes reductores y oxidantes, producción de cloro, hidrógeno, sosa, aluminio, zinc, compuestos orgánicos precursores, etc. En el ramo energético: baterías, acumuladores y celdas de combustible y celdas fotoelectroquímicas.

En el área electrónica: estudio de los materiales semiconductores y nanomateriales. En Química Analítica: diseño de electrodos selectivos de iones, sensores electroquímicos empleados en sistemas ambientales y biológicos. Estudio del equilibrio químico por medio de potenciometría, voltamperometría, conductimetría. En el área ambiental: sistemas de electrocoagulación y oxidación avanzada de compuestos orgánicos en el tratamiento de aguas. Electrorremediación de suelos contaminados, remoción de metales pesados vía electrolítica, sistemas acoplados de para productos oxidantes y desinfectantes *in situ*.

En el área médica: estudios de transporte de iones, mediciones de potenciales de membrana, estudios de toxicología y cuantificación *in vivo* de metabolitos por medio de microelectrodos, sensores basados en actividades enzimáticas. Y un gran etcétera.

La Electroquímica está presente en todas las reacciones químicas: pues en todas existe la transferencia de electrones. Esto permite que puedan ser medidas de forma controlada y precisa. Al ser un híbrido entre los fenómenos eléctricos y químicos, es un reto para los estudiantes de química para que se aventuren a dar un guiño con la física de forma permanente, pero con excelentes recompensas intelectuales y materiales.

BIBLIOGRAFÍA

- Medina, A. A. La Electroquímica, presente y futuro. *Revista de la Academia Canaria de Ciencias*, **1990**, 171-190.
- a) Chang, R. Química, 7a edición. McGraw Hill, México **2003**. b) Ball, D. Físicoquímica. International Thomson Editores, México **2004**.
- Julve, E. . Historia de la galvanotecnia y técnicas afines. 2009, *Anales de la Química*, 227-233.
- Ruiza, M.; Fernández, T.; Tamaro, E. *Biografía de Charles Coulomb. En Biografías y Vidas. La enciclopedia biográfica en línea. 2004 Barcelona (España)*. Obtenido de Biografías y Vidas: <https://www.biografiasyvidas.com/biografia/c/coulomb.htm> el 29 de enero de 2020
- Gallone, P.; Modica, G.; Maffi, S. (). Galvani's frog: Harbinger of a new era. *Electrochimica Acta*, **1986**, 1486-1490.
- Torres, R. G. *Michael Faraday*. CONALEP - LIMUSA. México, 1988.

Por Gonzalo Ramírez García

fOTO QUÍMICA

LA LUZ HA PARTICIPADO EN DIVERSAS REACCIONES QUÍMICAS DESDE MILLONES DE AÑOS ANTES DE LA EXISTENCIA DE LA VIDA MISMA, DANDO LUGAR POR EJEMPLO A LA FORMACIÓN DE LA ATMÓSFERA TERRESTRE. DE ESE MODO, EL SOL ES UNA FUENTE PRIMORDIAL DE ENERGÍA, Y ES CAPAZ DE TRANSFERIRLA A LA TIERRA EN FORMA DE LUZ INCLUSO A DISTANCIAS INTERESTELARES. AUNQUE EN NUESTROS DÍAS PODEMOS ATRIBUIR LA FOTOSÍNTESIS OCURRIDA EN LAS PLANTAS Y OTROS ORGANISMOS A LA FOTOQUÍMICA, EL DESARROLLO DE LOS FENÓMENOS QUE GENERARON LA TEORÍA QUE HA PERMITIDO EXPLICAR SU FUNCIONAMIENTO HA REQUERIDO VARIOS CIENTOS DE AÑOS.^{1,2}

De manera simplificada, la fotoquímica es el estudio de los procesos y fenómenos químicos que ocurren debido a la absorción de la luz. Cuando una molécula absorbe un fotón, la partícula elemental que constituye la luz, su estructura electrónica presenta modificaciones que le permiten reaccionar con otras moléculas. Desde hace mucho tiempo se pensaba que la luz solamente podía desencadenar fenómenos ópticos como la reflexión, dispersión o la refracción, para formar por ejemplo sombras o un arcoíris. Sin embargo, imaginar que la luz fuera capaz de producir cambios químicos no representó una tarea fácil para los primeros fotoquímicos.

Se cree que el primer registro de un fenómeno de este tipo fue estelarizado en el siglo IV a.C. por *Alejandro Magno*, quien observaba la apariencia de una sustancia impregnada en las insignias de sus soldados que cambiaba de color debido a la exposición a la luz del sol (un agente fotocromático), indicando el momento preciso para iniciar sus ataques.

En el siglo siguiente, *Arquímedes* utilizó cristales con el objetivo de “concentrar la luz del sol”, logrando lo que ahora conocemos como reacciones de combustión. El principio era similar al observado al quemar un trozo de papel con una lupa. A pesar de dicho avance, esta idea de concentrar la luz mediante lentes o espejos no fue retomada sino hasta finales del siglo XVI por *Conrad Gesner*, quien planteó el uso de la energía solar para el calentamiento y posterior destilación de diversas sustancias, y por *Andreas Libavius*, quien en esa época realizó algunas reacciones de combustión al lograr el calentamiento de diversos materiales hasta su punto de ignición. Es remarcable que hasta ese momento se entendían los efectos de la luz solamente como fenómenos físicos, y no fue sino hasta el siglo XVIII que se comenzaron a entender como fenómenos químicos activados por la luz.

En aquella época, *Joseph Priestley* fue capaz de observar mediante artefactos similares y utilizando también la luz del sol, la conversión del mercurio líquido en un sólido de color rojo, disminuyendo además el volumen de aire de manera simultánea durante la reacción. Sin embargo, *Antoine Laurent Lavoisier* fue quien interpretó de manera adecuada dicho experimento como una reacción entre el mercurio y el oxígeno, a la que llamó “oxidación”. Por ello y otros muchos estudios, Lavoisier es ahora reconocido como “el Padre de la Química Moderna”. Para imaginar la relevancia de estos descubrimientos, recordemos que muchos de los alquimistas en esa época soñaban con el arte de transmutar los metales en oro. Tanto *Priestley* como *Lavoisier* son figuras científicas de renombre en el movimiento cultural e intelectual conocido como “Ilustración” o “siglo de las luces”, y sus observaciones fueron los primeros indicios que después dieron lugar al entendimiento de la fotosíntesis en las plantas.

Ya en el año 1834, *Hermann Trommsdorff* reportó el cambio de color de la santonina por efecto de la exposición a la luz solar, una molécula con efectos antiparasitarios aislada de la planta *Artemisa campestris*. El resultado de dicha reacción es ahora conocido de manera coloquial como la lumisantonina, representando el primer ejemplo de la fotoquímica en estado sólido, aunque las estructuras e intermedios involucrados no fueron definidos sino hasta mucho tiempo después. A partir del inicio del estudio de la lumisantonina, la luz ha sido involucrada en la transformación de compuestos orgá-

nicos cada vez más complejos, como los fotodímeros reportados inicialmente por *Karl Fritzsche* en 1867 y por *Theodor Liebermann* en 1877, o los isómeros *cis-trans* descritos por *William H. Perkin* en 1881 con ayuda de disoluciones coloridas que utilizó como “filtros” de la luz solar, evaluando de ese modo el efecto de las longitudes de onda en sus reacciones. Por su parte, *Heinrich Klinger*, describió las reacciones de reducción de carbonilos por exposición a la luz para la producción de quinas modificadas, por lo que puede ser considerado la primera persona en utilizar la fotoquímica con fines sintéticos. Es importante remarcar que la fotoquímica estuvo sumamente limitada en las épocas de los descubrimientos aquí descritos, e incluso durante gran parte del siglo XX debido principalmente a la falta de las actuales técnicas e instrumentos de caracterización. A pesar de ello, esos descubrimientos son ahora pilares de la química moderna.

Hasta nuestros días, la fotoquímica ha sido catapultada como una gran fuente de avances científicos y tecnológicos, dando lugar a la obtención de todo tipo de moléculas. Los sistemas fotoquímicos que usan la luz solar son ahora los responsables de importantes reacciones utilizadas para generar electricidad, representando una fuente de desarrollo de fuentes sustentables de energía. Gracias a la fotoquímica también se han permitido avances en la agricultura, optimizando por ejemplo la producción de alimentos en invernaderos mediante la incentivación de la fotosíntesis. Otra aplicación moderna es el desarrollo de sensores basados en las variaciones en la intensidad de la luminiscencia generada por efectos fotoquímicos.³ En aspectos biomédicos, se sabe que la exposición a dosis adecuadas de luz solar es necesaria para la síntesis de vitamina D por el organismo, pero su exceso puede causar la dimerización de la timina, la cual puede inducir la aparición de cáncer de piel. La fotoquímica también puede ser utilizada para la síntesis de agentes farmacéuticos, para la liberación controlada de fármacos mediante la apertura de “compuertas moleculares” activadas por la luz, y hasta para el diseño de estrategias terapéuticas *per sé*, como la terapia fotodinámica, capaz de inducir la muerte de células cancerosas mediante la producción de radicales libres.⁴

Gracias a los recientes avances en la óptica y la nanotecnología, la fotoquímica ha permitido alcanzar nuevos horizontes con la aplicación de nuevos láseres y fuentes de luz, así como de nanomateriales luminiscentes como convertidores o almacenadores de energía luminosa, permitiendo la excitación de otras moléculas fotosensibles en regiones bien definidas. Por lo tanto, la luz seguirá siendo por muchos años una herramienta poderosa para el desarrollo y activación de compuestos químicos con innumerables aplicaciones, mismas que le darán brillo a nuestro futuro.

REFERENCIAS

1. Aaron B. Beeler. *Introduction: Photochemistry in Organic Synthesis*. **Chemical Reviews**. 2016, 116, 9629–9630.
2. Heinz D. Roth. *The beginnings of organic photochemistry*. **Angewante Chemie International Edition**. 1989, 1193-1207.
3. Gonzalo Ramírez-García *et al.* *A turn-on luminescence method for phosphate determination based on fast green-functionalized ZrO₂:Yb,Er@ZrO₂ core@shell upconversion nanoparticles*. **Analytical Chemistry**. 2019, 91, 14657-14665.
4. Gonzalo Ramírez-García *et al.* *An immunoconjugated up-conversion nanocomplex for selective imaging and photodynamic therapy against HER2-positive breast cancer*. **Nanoscale**. 2018, 10, 10154-10165.

Por
Daniel Olea

RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

Las técnicas de Resonancia Magnética Nuclear (RMN o NMR por sus siglas en inglés para *Nuclear Magnetic Resonance*) son un instrumento indispensable para la química, así como para otras ramas de la ciencia. Con la espectroscopia de RMN se pueden identificar moléculas (Figura 1.a)), determinar su estructura o estudiar procesos dinámicos. En la actualidad la RMN es la técnica más empleada en la elucidación de estructuras moleculares. Por otro lado, las técnicas de imagen de RMN son una herramienta indispensable en el diagnóstico en medicina, ya que con ello es posible observar estratos de tejidos, órganos y sistemas sin la necesidad de llevar a cabo intervenciones quirúrgicas. (Figura 1. b)).

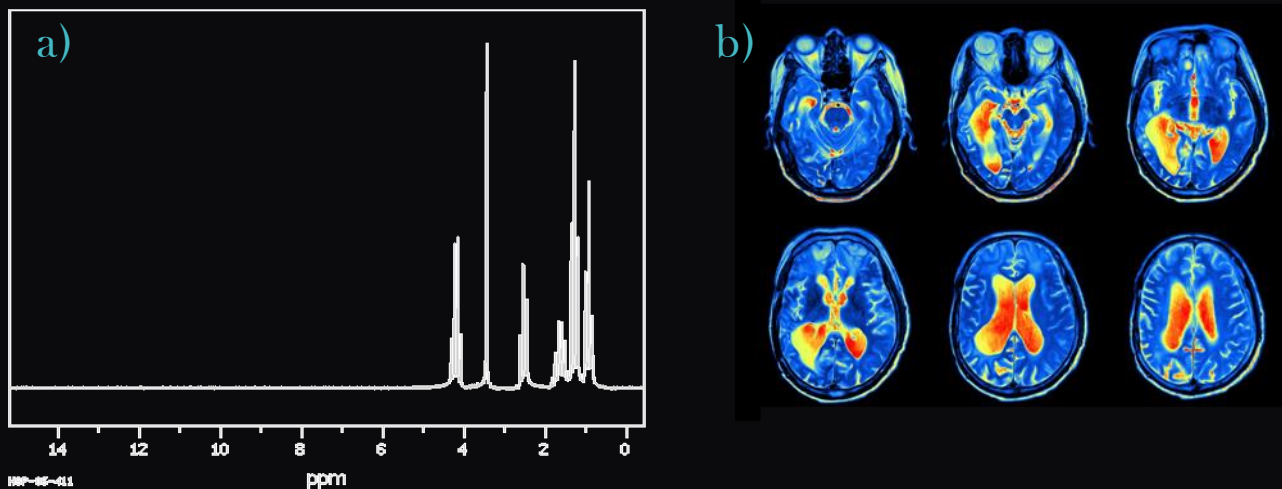


Figura 1. Dos aplicaciones de la resonancia magnética nuclear (RMN). a) asignación estructural de moléculas orgánicas b) imagenología médica.

Fue en 1902 que el físico P. Zeeman compartió el Premio Nobel por el descubrimiento de que el núcleo de ciertos átomos se comporta de forma particular cuando se somete a un campo magnético fuerte. 50 años después, en 1952, los físicos Félix Bloch y Edward Mills Purcell compartieron otro Premio Nobel por el uso del llamado Efecto Zeeman en la construcción del primer espectrómetro de RMN.

Los compuestos examinados por RMN están formados por moléculas, es decir, átomos enlazados. Cada átomo se compone de electrones cargados negativamente, los cuales describen orbitales alrededor de un núcleo. El tamaño del átomo es el volumen del orbital descrito por el electrón, sin embargo, el 99.9% de la masa de un átomo está en el núcleo, a pesar de que éste ocupa un trillonésima parte (10^{-12}) de su volumen. Los núcleos a su vez están formados por protones y neutrones –y ahora sabemos que por otras partículas subatómicas–

El número de protones en un átomo determina su identidad (Z , número atómico) y la carga del núcleo, así por ejemplo, cada átomo que tenga un protón en su núcleo es un hidrógeno o cada átomo que tenga seis protones será un carbono, sin embargo, no todos los átomos de un mismo elemento tienen la misma cantidad de neutrones; cuando esto sucede, se dice que se tiene un isótopo, es decir, un átomo del mismo elemento que tiene diferente cantidad de neutrones. La mayoría de los hidrógenos de la naturaleza (99.985% exactamente) no tienen neutrones ($N=0$), pero una pequeña fracción (0.015%) tienen un neutrón ($N=1$) además del protón, a estos isótopos del hidrógeno se les conoce como protio y deuterio y tienen los símbolos ^1H y ^2H , respectivamente. Así, la masa (A) de un átomo es la suma de su número de los valores de Z y de N .

Al poco tiempo del descubrimiento de la estructura atómica se descubrió también que el electrón es una partícula que gira sobre su propio eje, a lo cual se le conoce como *momento angular del spin*, es decir, se comportan como pequeños imanes. El protón también tiene ese comportamiento y como en el electrón, su momento magnético (m) tiene solo dos posibles orientaciones ($+1/2$ y $-1/2$). Y bueno, resulta ser que los neutrones también muestran un momento dipolar, a pesar de que están descargados, y también pueden adoptar dos diferentes orientaciones.

Durante los años del descubrimiento de la RMN, se descubrió que sólo puede utilizarse para estudiar núcleos atómicos con un número impar de protones o neutrones (o de ambos) y spin nuclear no-cero (núcleos con cero spin nuclear –aunque tengan N o Z pares– tienen cero momento magnético y no es posible detectarlos por RMN). Esta condición se presenta en los átomos de ^1H , ^{13}C , ^{19}F y ^{31}P , sus núcleos son magnéticamente activos. La capacidad para interactuar con un campo magnético se conoce como *proporción giromagnética* y es diferente para cada núcleo.

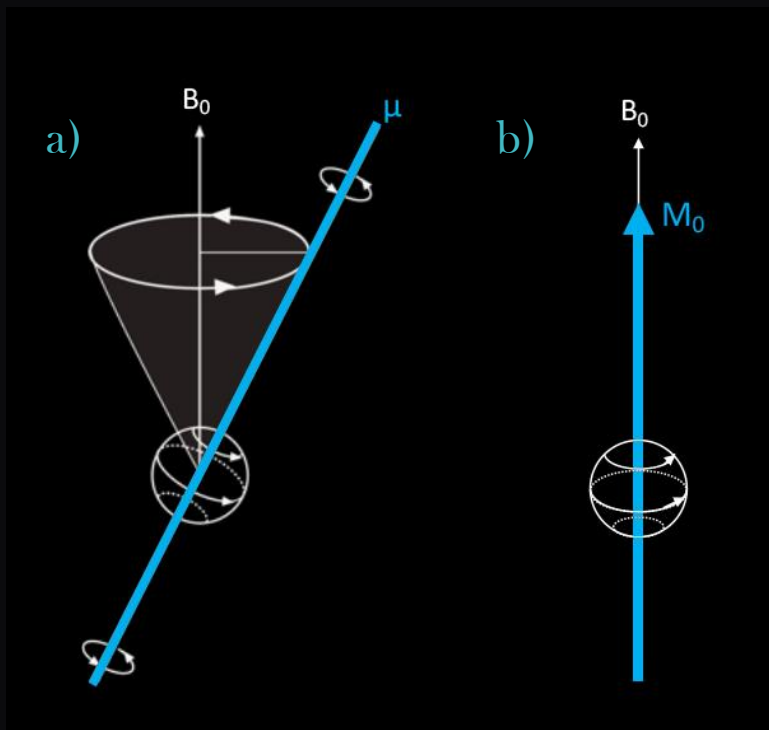


Figura 2. a) Un campo magnético intenso estático (B_0) aplicado a un núcleo atómico, provoca que el spin del núcleo gire (precese) alrededor de B_0 y en su propio eje. Este movimiento se conoce como *Precesión de Larmor*. b) Es posible calcular un vector total de todas las posibilidades de precesión, el cual es llamado M_0 .

Cuanto un átomo con propiedades magnéticas como las descritas antes se coloca en presencia de un intenso campo magnético externo (B_0), el spin de su núcleo puede asumir diferentes orientaciones. Un núcleo de un átomo de hidrógeno puede orientarse en dirección de dicho campo magnético o en sentido contrario. Las orientaciones a favor del campo magnético son más favorables que las que están en contra, por lo que son las más útiles para medirse, sin embargo, la cantidad de spines alineados a B_0 se anulan por los alineados en contra, así, solo los excesos de spines alineados a B_0 son útiles, además, el campo magnético ejerce un torque en el momento angular de los spines nucleares, esto provoca que los spines describan movimientos circulares alrededor del campo magnético (Figura 2a). Este movimiento se conoce como *Precesión de Larmor*. Así, tomando en cuenta a los spines “sobrantes” alineados a B_0 y el vector resultante de los giros de la precesión, es posible calcular un vector total, al cual generalmente se le llama M_0 . (Figura 2b). La resonancia magnética ocurre cuando a dicho vector se le aplica un pulso de radiofrecuencia (B_1) en el rango de las ondas de radio.

La resonancia magnética en un sentido práctico y experimental manipula la intensidad, el tiempo y el ángulo (respecto a B_0 y M_0) de aplicación de dicha radiofrecuencia (B_1) y mide los efectos posteriores. La aplicaciones de un haz de radiofrecuencia (pulsos) suelen tardar unas fracciones de segundo y generalmente se aplican en una dirección perpendicular a B_0 y M_0 , lo que provoca que M_0 experimente un torque o perturbación desde B_0 y se redireccione en la dirección del pulso y se dice entonces que los spines tienen ahora *coherencia de fase*.

Una vez finalizado el pulso, y perturbados los spines, éstos buscan redireccionarse a B_0 (Figura 3). Un experimento común de resonancia medirá qué tanto tiempo y energía intervienen en llevar a cabo esa redirección. Sin entrar en mucho detalle, podemos decir que dicho redireccionamiento depende del tipo de átomo, y de los átomos que tenga enlazados o cercanos a él. Así, cuando se tiene un conjunto de átomos enlazados formando una molécula, cada uno tendrá un entorno químico distinto lo que provocará que su realineación a B_0 sea distinta a la de otros átomos. Un ordenador recoge la intensidad respecto al tiempo y convierte dichos datos en intensidad respecto a frecuencia.

La nube electrónica que existe alrededor de cada núcleo actúa como una corriente eléctrica en movimiento que, como respuesta al campo magnético externo, genera una corriente inducida que se opone a dicho campo. El resultado de este hecho es que el campo magnético que realmente llega al núcleo es más débil que el campo externo, por tanto, se dice que el núcleo está protegido o apantallado. Así, el campo magnético efectivo (H_{ef}) que llega a un protón dentro de una molécula es siempre menor que el campo externo, y por lo tanto, para que el núcleo entre en resonancia dicho campo externo debe ser mayor.

Si todos los hidrógenos de una molécula orgánica estuvieran apantallados de igual forma, todos entrarían en resonancia con la misma combinación de frecuencia y campo magnético. Sin embargo, los protones se hallan dentro de entornos electrónicos diferentes y, por tanto, se encuentran diferentemente protegidos o apantallados.

Por ejemplo, en el metanol el átomo de oxígeno retira densidad electrónica del entorno electrónico que rodea al protón del grupo hidroxilo, quedando este átomo de hidrógeno menos protegido que los protones del grupo metilo. La consecuencia es que el protón del grupo hidroxilo resuena a un campo magnético menor que los protones del metilo. El resultado es un espectro de diversas frecuencias donde cada conjunto de núcleos específicos da origen a una señal única de RMN. Así pues, un espectro de RMN es una gráfica de la intensidad de señal en función de la frecuencia de la energía electromagnética que liberan los diversos núcleos de una muestra.

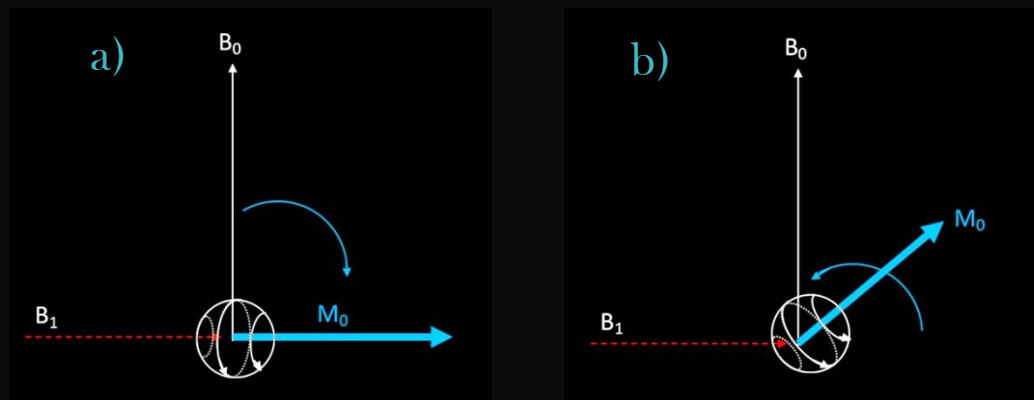


Figura 3. a) La aplicación de un pulso de radiofrecuencia B_1 provoca que M_0 se desvíe de B_0 . b) el tiempo que tarda y la energía que emplea M_0 en regresar a alinearse con B_0 es lo que provoca que sea posible distinguir distintos átomos enlazados en una molécula.

Las muestras pueden ser estudiadas en su estado natural sin un tratamiento previo. Es por ello que la química y la medicina se están convirtiendo en una poderosa fuerza impulsora de desarrollo técnico en el ámbito de la RMN. La posibilidad de analizar mezclas directamente mediante métodos basados en RMN, junto con los métodos de análisis estadístico y quimiométrico, están haciendo que la espectroscopia de RMN sea el método de elección para el análisis de mezclas biológicas complejas.

En su faceta médica, la RMN es un método no invasivo que permite estudiar las moléculas químicas de los seres vivos. Esta metodología puede determinar cualitativa y cuantitativamente compuestos en cada tejido, proporcionando una información extensa sobre su metabolismo.

BIBLIOGRAFIA

- Alberto Requena y José Zúñiga “Espectroscopia”, Ed., Pearson Education S.L., 2010
- P.W. Atkins y Julio de Paula “Química Física”, 8a Ed., Medica Panamericana, 2008
- Thomas Engel y Philip Reid “Química Física”, Pearson Educación S.L., 2006
- Ira N. Levine “Fisicoquímica, 4a Ed., McGraw Hill, 2009
- Gary KVR, Govil G. NMR in Biological Systems. Dordrecht: Springer; 2008.
- Hollis DP. Quantitative Analysis of Aspirin, Henacetin, and Caffeine Mixtures by Nuclear Magnetic Resonance Spectrometry. *Anal Chem* 1963;35(11):1682-4.
- Jacobsen NE. NMR Spectroscopy Explained: Simplified Theory, Applications and Examples for Organic Chemistry and Structural Biology. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc.; 2007.
- Bharti SK, Roy R. Quantitative ^1H NMR Spectroscopy. *Trends Anal Chem* 2012;35:5-26.
- Frasch CE. Preparation of Bacterial Polysaccharide–Protein Conjugates: Analytical and Manufacturing Challenges. *Vaccine*. 2009;27:6468-70.
- Jones C, Whitley C, Lemercinier X. Full Assignment of the Proton and Carbon NMR Spectra and Revised Structure for the Capsular Polysaccharide from *Streptococcus pneumoniae* Type 17F. *Carbohydr Res* 2000;325:192-201.
- Lemercinier X, Jones C. Full ^1H NMR Assignment and Detailed O-Acetylation Patterns of Capsular Polysaccharides from *Neisseria meningitidis* Used in Vaccine Production. *Carbohydr Res* 1996;296:83-96.

Muchos procesos y transformaciones químicas ocurren en una fase líquida, esto es debido a que en ese estado la movilidad de las moléculas involucradas es considerablemente mayor que en el estado sólido y tienen mayores probabilidades de experimentar procesos dinámicos que las lleven a acercarse a las distancias de un enlace y llevar a cabo transformaciones. En ese sentido, el estado gaseoso sería el estado ideal para llevar a cabo un proceso químico, sin embargo, como bien sabemos, no todas las sustancias se encuentran en el estado líquido y muy pocas en el gaseoso. Una alternativa a este problema, y que fue descubierta en los inicios de la alquimia misma, es la disolución.

Una disolución es una mezcla homogénea de dos o más sustancias. El soluto es el componente que se encuentra en distinto estado físico que la disolución y se encuentra en menor proporción; el disolvente es la sustancia que está en igual estado físico que la disolución y se encuentra en mayor proporción. Así, podemos considerar mezclas entre gases, líquidos y sólidos disueltos en sólidos, gases y líquidos. Las disoluciones se caracterizan por tener una fase homogénea, es decir, una muestra de la disolución tendrá las mismas características físicas, químicas y organolépticas que la mezcla total. Las dos infografías de las páginas siguientes ayudarán a entender mejor las propiedades de las soluciones.

Históricamente las disoluciones se han empleado como medio de ejecución y estudio de las transformaciones químicas, casi a cualquier especialista químico de la actualidad, al presentarle un problema, buscaría estudiarlo en forma de disolución.

Como decíamos, aparentemente la razón por la que las disoluciones se han empleado preferentemente en química, es debido a que emulan en muchos aspectos al estado gaseoso, que sería el estado ideal para un proceso químico. Realmente los primeros alquimistas y buena parte de los químicos posteriores a Lavoisier no sabían esto, pero fue un joven químico, que tenía buenas habilidades matemáticas y experimentales quien propuso esta analogía solución

gas. En uno de los documentos esenciales de la química (en el journal *Zeitschrift für physikalische Chemie*, el artículo *The Role of Osmotic Pressure in the Analogy Between Solutions and Gases*, en 1887), van't Hoff colocó una piedra angular en el terreno de la fisicoquímica al enunciar una "analogía" –de hecho van't Hoff la llamó "una profunda analogía, casi una identidad"– entre la presión osmótica de una solución y la presión de un gas. En ese trabajo se mostraban los resultados de asociar la presión osmótica de una solución diluida con los abatimientos del punto de fusión y de presión de vapor del disolvente, como había sido reportado por Raoult en 1886, para ello, van't Hoff había utilizado como herramienta la Ecuación del Gas Ideal. A partir de entonces la medición y explicación de fenómenos como la presión osmótica y la temperatura, la presión osmótica y difusión, el abatimiento del punto de fusión, la presión osmótica en soluciones concentradas, fueron posibles considerando la presión del soluto como si fuera un gas ocupando el mismo volumen.

SOLUCIONES

Por Luz Díaz Cardona

El mismo Nerst llamó a esta aportación como un “golpe maestro” en el establecimiento de la fisicoquímica como ciencia y él mismo explicó sus estudios en electroquímica, como el potencial de un electrodo, como el balance entre la presión de una solución en el electrodo contra la presión de los iones en solución”.

Con el desarrollo de la teoría termodinámica durante el siglo XIX, la fisicoquímica se fue fraguando, y esto resultó del estudio de las soluciones. La aplicación de las leyes de la termodinámica a sustancias disueltas inició con Kirchoff en 1858 y sus observaciones fueron organizadas y ampliadas por Gibbs en 1876, por van't Hoff en 1887 y por von Zawidski, en 1900, este último al estudiar mezclas binarias concentradas de disolventes.

Para la primera década del siglo XX las cosas comenzaron a complicarse, ya que nuevos y más finos estudios y mediciones delataron que las soluciones no siempre pueden explicarse recurriendo a las leyes de los gases, y mucho menos a la ecuación de gas ideal. Fue a partir de entonces que la termodinámica de soluciones se abrió paso con nuevos conceptos como *potencial termodinámico*, *actividad termodinámica*, *fugacidad* y *cantidades molares parciales*, y que las primeras ecuaciones fisicoquímicas evolucionaron a afirmaciones más complicadas como las de Van Laar y Van der Waals.

Durante prácticamente toda la mitad del siglo XX los estudios de las soluciones continuaron enfocándose en los mecanismos de disolución de prácticamente todas las especies químicas descritas hasta ese momento: reactivos, productos, sustancias iónicas (atómicas, moleculares inorgánicas y orgánicas), polares, apolares. Entramos a la segunda mitad del siglo XX con la descripción de mecanismos complicados como cajas de disolventes, catálisis de transferencia de fase, pares iónicos íntimos y discretos, catálisis miscelares entre otros.

Podríamos decir que el estudio de las soluciones reguló buena parte de la química hasta nuestros días. Las soluciones han servido para estudiar y llevar a cabo síntesis, catálisis; para el desarrollo de técnicas analíticas como resonancia magnética nuclear, cromatografía, potenciometría, farmacia, clínica, entre tantas otras.

En los últimos años ha habido una fuerte tendencia a desplazar el uso de disolventes de técnicas analíticas, farmacéuticas y sintéticas y se han desarrollado técnicas como el ball milling o la catálisis micelar, pero no podemos dejar de lado nuestro legado en solución.

BIBLIOGRAFÍA

1. Díaz Vera y Salazar Sandoval. UNAM. Clasificación de las disoluciones.: <http://depa.fquim.unam.mx/fina/presenta/clasdisol.pdf>
2. Wayne E. Wentworth, S. Jules Ladner. Fundamentos de química física. Editorial Reverté. : <https://books.google.com>
3. Gómez. Disoluciones: https://www.uv.es/~gomezcb/QMA/Tema6_presentacion.pdf
4. Euskadi. Disoluciones estándar: Concentración: <https://www.hiru.eus/es/quimica/disoluciones-estandar-concentracion>.
5. Centro de Estudios Cervantinos. Disoluciones. Tipos y ejemplos: <https://www.centroestudioscervantinos.es/disoluciones/>
6. Natalia Clara. Blog. Definición de disolución, solvente y soluto: <https://nataliaclaratic.wordpress.com/2012/01/19/definicion-de-disolucion-solvente-y-soluto/>
7. López Carmen. Propiedades coligativas.
8. https://prezi.com/_whykxt-ntbh/propiedades-coligativas-de-las-disoluciones/
9. Ruiz, Muñoz. 2011. Fundamentos químicos de ingeniería: https://ocw.ehu.eus/pluginfile.php/4069/mod_resource/content/1/TEMA_6_DISOLUCIONES_Y_PROPIEDADES_COLIGATIVAS/Tema_6_Disoluciones.pdf
10. Hildebrand, J. **A History of Solution Theory**. *Ann. Rev. Phys. Chem.* **1981**, 32, 1-23.



% PORCENTAJE



La concentración de un soluto en un disolvente se expresa mediante una asociación de unidades de masa o de volumen del soluto con la masa o el volumen de la disolución. La unidad de masa habitual es el gramo (g) o el mol (n) y la unidad de volumen, el litro (L).

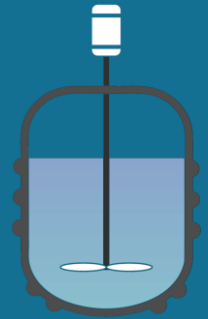
Porcentaje Masa (%_m ; %^{w/w})

$$\%w/w = \frac{m_{\text{soluto}}}{m_{\text{solución}}} * 100$$

Porcentaje Volumen (%_v ; %^{v/v})

$$\%v/v = \frac{V_{\text{soluto}}}{V_{\text{solución}}} * 100$$

Estas formas de expresar concentración son útiles en procesos a nivel industrial.



UNIDADES DE CONCENTRACIÓN

%mol

$$\%n = \frac{n_{\text{soluto}}}{n_{\text{disolvente}} + n_{\text{soluto}}} * 100$$



Molalidad (m) o concentración molar es el número de moles de soluto por kilogramo de disolvente.

$$m = \frac{n_{\text{soluto}}}{Kg_{\text{disolvente}}}$$

Útil en soluciones sólido-sólido como las aleaciones.

La Normalidad (N), es la concentración de equivalentes químicos (EQ) por litro de solución.

$$N = \frac{EQ}{L_{\text{solución}}}$$

VALOR DE CONCENTRACIÓN, antes llamado molaridad (M) o concentración molar. Es la cantidad de moles del soluto por cada litro de disolución.

$$M = \frac{n_{\text{soluto}}}{L_{\text{solución}}}$$

Desde 1997 la IUPAC ya no recomienda el uso de término "molar" para referirse a esta unidad de concentración.

<https://goldbook.iupac.org/terms/view/A00295>

La fracción molar (X) es el cociente del número de moles de soluto y el número total de moles (disolvente más soluto).

$$X_n = \frac{n_{\text{soluto}}}{n_{\text{Totales}}}$$

PARTES POR MILLÓN (ppm) expresa los mg de soluto por kg o litro de solución.

$$ppm = \frac{mg_{\text{soluto}}}{Kg_{\text{solución}}} = \frac{mg_{\text{soluto}}}{L_{\text{solución}}} = \frac{g_{\text{soluto}}}{m^3_{\text{solución}}}$$

Cuando un soluto y un disolvente dan origen a una disolución, la presencia del soluto modifica las propiedades que presenta el disolvente en estado puro, las que dan origen a las propiedades de la disolución, que pueden ser constitutivas o coligativas.

PROPIEDADES CONSTITUTIVAS

Aquellas que dependen de la naturaleza de las partículas disueltas, por ejemplo, la viscosidad, la densidad, y la conductividad eléctrica.

PROPIEDADES COLIGATIVAS

Dependen del número de partículas disueltas en una cantidad fija de disolvente, es decir, la concentración de soluto, y no de la naturaleza de estas partículas. presión osmótica.

PROPIEDADES DE LAS SOLUCIONES

PROPIEDADES COLIGATIVAS

DISMINUCIÓN DE LA PRESIÓN VAPOR

La presión de vapor de un solvente con un soluto no volátil disuelto, es menor que la presión del mismo solvente en estado puro. Este fenómeno se conoce como Ley de Raoult

VARIACIÓN DE PUNTO DE EBULLICIÓN

La presencia de un soluto no volátil en una solución ocasiona la elevación del punto de ebullición de la solución. Esto debido a que las moléculas de soluto al retardar la evaporación de las moléculas del disolvente hacen disminuir la presión de vapor por lo que la solución requiere de mayor temperatura para que su presión de vapor se eleve o iguale a la presión atmosférica.

PRESIÓN OSMÓTICA

La presión osmótica de una disolución equivale a la presión mecánica necesaria para evitar la entrada de agua cuando está separada del disolvente por una membrana semipermeable.

VARIACIÓN DEL PUNTO DE CONGELACIÓN

Las soluciones siempre se congelan a menor temperatura que el disolvente puro.

LEY DE HENRY

Establece que la solubilidad de un gas en un líquido es proporcional a su presión parcial y a su coeficiente de solubilidad, a una temperatura constante.

LOS Geber & Lav Químicos

Los orígenes
de Lav

Equipado con sus cinco sentidos,
el hombre explora el universo que lo rodea
y a sus aventuras las llama ciencia.

-Edwin Powell Hubble

Desde nuestros remotos inicios...



En cada descubrimiento...



Casi pasando desapercibido...



Ha estado presente...



Siempre acompañando la Ciencia.





Sentaron las bases de la química dejando una huella radiante en la historia...



Incluso actualmente mantengo contacto
aquellos grandes genios contemporáneos...



Roald Hoffman

by Low

Frances Hamilton Arnold



Pues siempre estamos a un paso del
siguiente gran descubrimiento...

Y ahora...
¡Es momento de que
los conozcas!





QUIMIOFILIA