

TEORÍA ATÓMICO-MOLECULAR DE LA MATERIA

CONCEPTO DE ELEMENTO QUÍMICO DE BOYLE Y LAVOISIER

En 1808, Dalton (1776-1844) expuso la teoría atómica de la materia. Para entonces se había acumulado un conjunto de conocimientos de Física y de Química en los que se pudo apoyar firmemente. De los conocimientos de Química destacamos dos aspectos: el concepto de elemento y las leyes ponderales de las reacciones químicas.

Acerca del concepto de elemento, comentamos en el tema dedicado al debate histórico entre continuidad y discontinuidad de la materia, que en la antigüedad ya se había sugerido la idea de que todas las sustancias podrían ser combinaciones de unas pocas "elementales". Así lo supuso la teoría de Empédocles (495/490 a. C a 435/430 a. C), que consideró cuatro elementos primordiales: fuego, aire, tierra y agua. Estos cuatro elementos fueron asumidos también por Platón (427 a. C - 347 a. C.) y por Aristóteles (384 a. de C. - 322 a. de C.) en sus teorías sobre la materia.

Ideas similares formaron parte del bagaje científico escolástico, reflejado en la literatura alquímica. La alquimia se practicó en Mesopotamia, en el Antiguo Egipto, en Persia, en la India, en China, en la Antigua Grecia y el Imperio Romano, en el Imperio Islámico y después en Europa, a través de una compleja red de escuelas y sistemas filosóficos que abarca 2500 años. Los alquimistas también creyeron que el Universo estaba compuesto de los cuatro elementos primordiales (tierra, aire, fuego y agua) y preparaban con ellos un quinto elemento al que atribuían la potencia de los cuatro en su máxima exaltación y equilibrio. Consideraron además que cada reino tenía una meta: el reino mineral la transmutación de metales vulgares en oro o plata y el reino animal la creación de una "panacea", un remedio que curaría las enfermedades y prolongaría la vida indefinidamente. Durante siglos pretendieron infructuosamente obtener oro mediante el mencionado proceso de transmutación, que requería utilizar lo que llamaron la *pedra filosofal*, una sustancia que tendría propiedades extraordinarias, entre ellas esa capacidad de transmutar los metales vulgares en oro.

Estas ideas predominaron hasta principios del siglo XVII, cuando Boyle (1627-1691) sentó las bases de una profunda reorientación que impulsó a la Química frente a la Alquimia.

En el tema dedicado al estudio del comportamiento de los gases se exponen aportaciones muy importantes que hizo



Boyle (1627 - 1691)

Boyle en Física, como sus estudios experimentales sobre el comportamiento del aire y la afirmación de su naturaleza cinético-corpúscular. El mismo Boyle hizo contribuciones igual o más importantes en Química, recogidas en la obra *El químico escéptico*, que publicó en 1661. Este libro comienza con una crítica rotunda a la teoría de los cuatro elementos de Aristóteles y a la idea de la piedra filosofal de los alquimistas. Seguidamente plantea un conjunto de nuevos conceptos, entre los que destaca una concepción clara de la noción de elemento químico. Este concepto ya había sido anticipado bastante antes por el ruso Lomonosov (1711-1765), pero sus escritos no fueron conocidos por los químicos de otros países y no hay mención de los mismos en la literatura

científica inglesa, francesa o alemana de la época.

Boyle definió los elementos como "*sustancias químicas que no se pueden separar en diferentes componentes por ningún medio*" y añadió que en una *mezcla*, los cuerpos que intervienen conservan cada uno sus propiedades y son fáciles de separar unos de otros, mientras que en una *combinación*, las partes constituyentes pierden sus propiedades primitivas y son inseparables por procedimientos físicos como filtraciones, destilaciones, etc.

Aunque durante un tiempo bastantes químicos del siglo XVII siguieron utilizando ideas antiguas, las nuevas ideas se consolidaron con Lavoisier (1753-1794), a quien se considera padre de la Química. El trabajo de Boyle había sentado las bases para una nueva orientación de la investigación química, pero careció realizaciones prácticas que la sustentaran. Lavoisier cubrió sobradamente esta carencia estudiando experimentalmente un gran número de procesos químicos. Una de sus muchas contribuciones fue refrendar empíricamente la definición de elemento químico: *"Todas las sustancias que no hemos podido descomponer por ningún medio son para nosotros elementos... No les debemos suponer compuestos hasta que la experiencia y la observación nos proporcionen la prueba"*.

Sobre esta base se llegaron a identificar una tercera parte de los elementos conocidos hoy en día, aunque, como el propio Lavoisier sospechaba, aquella lista incluyó algunas sustancias reconocidas más tarde como compuestos.

LEYES PONDERALES DE LAS REACCIONES QUÍMICAS

Las leyes ponderales de las reacciones químicas expresan relaciones cuantitativas que se pueden establecer entre las sustancias que intervienen en una reacción (ponderal se refiere a peso). Estas leyes son: la ley de conservación de la masa, la ley de las proporciones constantes o definidas y la ley de las proporciones múltiples. El establecimiento de estas tres leyes jugó un papel fundamental en el desarrollo de la teoría atómico-molecular de la materia.

Ley de conservación de la masa

Como se dice la página anterior, Lavoisier (1753-1794) realizó abundantes y detallados estudios teóricos y experimentales involucrando reacciones químicas (la oxidación de los cuerpos, la respiración animal y su relación con los procesos de oxidación, el análisis del aire,..). Además refrendó el concepto de elemento químico que había enunciado Boyle, e introdujo un método de nomenclatura química. Pero, probablemente su mayor contribución fue la formulación del principio de conservación de la masa en las reacciones.



Igual que ocurrió con el concepto de elemento químico, el principio de conservación de la masa también lo había anticipado Lomonosov (1711-1765). Pero se atribuye principalmente a Lavoisier, quien (probablemente sin conocer el trabajo de Lomonosov) realizó abundantes experimentos químicos cuantitativos para fundamentarlo. Lavoisier fue consciente de la importancia de conseguir un buen aislamiento de los reactivos e introdujo en sus experimentos una balanza sensible para medir cantidades de las sustancias que intervienen. Comprobó el principio de conservación de la masa en las reacciones y lo enunció en 1789 así: *"Debemos considerar un axioma incontestable que en todas las operaciones del arte y la naturaleza nada se crea; la misma cantidad de materia existe antes y después del experimento... y no ocurre otra cosa que cambios y modificaciones en la combinación de estos elementos. Todo arte de realizar experimentos químicos, depende de este principio."*

Ley de las proporciones constantes o definidas

La ley de las proporciones definidas también fue expresada por Lavoisier e indica que los compuestos químicos tienen poseen una composición definida o constante: *"Cuando dos o más elementos se combinan para formar un compuesto dado, la razón entre las masas de los elementos que intervienen es siempre la misma."*



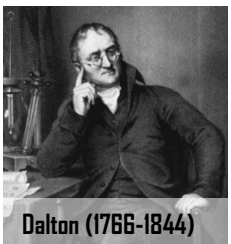
Esta ley, no obstante, se atribuye a Proust (1754-1826), otro químico francés. Proust desarrolló la mayor parte de su carrera en España y confirmó experimentalmente la idea de Lavoisier mediante análisis muy precisos tanto de minerales como de compuestos preparados en el laboratorio. *"Debemos reconocer - escribía Proust- que la composición y las propiedades de una combinación verdadera son siempre las mismas en cualquier punto de la Tierra. El cinabrio del Japón tiene la misma composición y las mismas propiedades que el de España; en todo el mundo no hay más que una sal común, un nitrato de potasio, etc. Los óxidos obtenidos por síntesis tienen la misma composición que los naturales,..."*

En aquel momento este principio contradecía las conclusiones del también químico francés Berthollet (1748-1822), que defendió que las proporciones en las que se combinaban los elementos en un compuesto dependían de las condiciones de su síntesis. Berthollet se apoyaba en la observación de excepciones a la ley de las proporciones definidas. Hoy sabemos que estas excepciones se deben a que bastantes compuestos (principalmente de estructura cristalina) presentan "defectos" en su estructura cristalográfica, entendiéndose por tales la ausencia en algunas zonas de algún tipo de átomos. Como consecuencia de ello estos compuestos pueden variar su fórmula empírica (no la fórmula ideal), por ejemplo, reduciendo la proporción de uno de los componentes.

Ley de las proporciones múltiples

Como ocurre con las dos anteriores, el establecimiento de esta ley es fruto del trabajo acumulado de numerosos investigadores, pero se atribuye a Dalton que la enunció a partir de los estudios que realizó para estudiar las proporciones en que se combinan elementos para formar compuestos (síntesis): *"Siempre que dos elementos se combinan para formar más de un compuesto, las proporciones en que lo hacen en los diferentes compuestos guardan entre sí una relación de números enteros sencillos."*

HIPÓTESIS ATÓMICO-MOLECULAR DE DALTON



En 1808 Dalton (1776-1844) enunció un conjunto de hipótesis sobre la estructura interna y discontinua de la materia. Dalton estaba al corriente de las leyes ponderales de las reacciones químicas que se exponen en las páginas anteriores de esta sección y de los trabajos de Boyle sobre el comportamiento físico y la estructura de los gases. Intentando dar una interpretación coherente a este conjunto de hechos formuló sus hipótesis que podemos resumir como sigue:

1) La materia es discontinua, está formada por átomos indivisibles. *"La materia - escribió Dalton - aunque divisible en un grado extremo, no es, sin embargo indefinidamente divisible. Debe haber un punto más allá del cuál no podemos ir en la división de la materia. La existencia de estas últimas partículas no puede apenas ponerse en duda, aunque sean tan pequeñas que no se puedan apreciar ni aún con los dispositivos microscópicos. Yo he elegido la palabra átomo para representar estas últimas partículas.."*

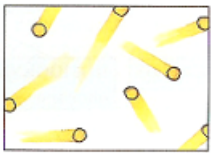
2) Los átomos son inmutables. *"Nunca se pueden transformar los unos en otros por ninguna potencia que podamos controlar".*

3) Los compuestos están formados por moléculas idénticas entre sí y constituidas por un número entero de átomos, siempre en la misma razón. "Dos o más clases de átomos pueden, por otra parte, combinarse de distintas maneras para formar más de una clase de moléculas"

4) La proporción en que se combinan los átomos para formar las moléculas es siempre una razón numérica muy sencilla. "El compuesto más estable y fácil de formarse (y, por tanto, el más abundante) será aquél cuyas moléculas estén formadas por un átomo de cada elemento".

5) En las reacciones químicas, los átomos ni se crean ni se destruyen, solamente cambia su distribución. "El análisis químico y la síntesis no pueden ir más allá de la separación de partículas, unas de otras, y de su reunión. Ninguna nueva creación o destrucción de la materia está dentro del alcance de los agentes químicos... Todos los cambios que podemos producir consisten en la separación de partículas que están en estado de cohesión o combinación y en la unión de aquellas que estaban inicialmente distanciadas.

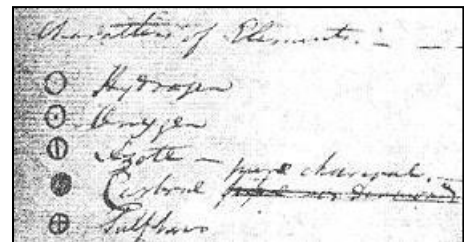
El conjunto de estas hipótesis se conoce como **Teoría atómico-molecular de Dalton**.



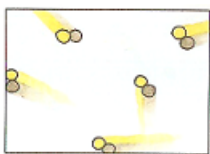
Resulta muy clarificador visualizar las hipótesis de Dalton en sustancias gaseosas. De acuerdo con dichas hipótesis, las sustancias simples que no pueden descomponerse en otras (los elementos), se representarán, en estado gaseoso, formadas por partículas o átomos iguales entre sí, pero distintos de un elemento a otro.

Este concepto permite atribuir a cada elemento una **fórmula química**, indicadora de que está constituido por átomos de una determinada variedad, A.

Oxygen	Hydrogen	Nitrogen (Azote)	Carbon	Sulphur	Phosphorus	Gold	Platinum (Platina)	Silver
Mercury	Copper	Iron	Nickel	Tin	Lead	Zinc	Bismuth	Antimony
Arsenic	Calcium (Lime)	Manganese	Uranium	Tunsten	Titanium	Cerium	Potassium (Potash)	Sodium (Soda)
Calcium	Magnesium (Magnesia)	Barium (Barytes)	Strontium	Aluminium	Silicon	Yttrium	Beryllium	Zirconium



Arriba se pueden ver unos apuntes de Dalton, donde dibujó una partícula para representar a cada elemento. A la izquierda se expone una réplica de las representaciones que hizo de los elementos conocidos en su época.



Por su parte, los compuestos también se consideran formados por partículas idénticas y diferentes de unos compuestos a otros. Pero, como se pueden descomponer en sustancias simples (elementos), se plantea que sus partículas sean "paquetes de átomos" (moléculas). La cuarta hipótesis propone que la proporción en que se combinan los átomos sea siempre una razón numérica muy sencilla y, según Dalton, el compuesto más estable y fácil de formarse sería aquél cuyas moléculas están formadas por un átomo de cada elemento, A y B. Por tanto, su fórmula química sería AB.

En todas estas predicciones subyace una hipótesis llamada regla de máxima simplicidad, que responde a la idea de que la materia adopta las formas más sencillas posibles en su organización. Esta hipótesis en seguida se reveló como la más endeble del conjunto, puesto que llevó a atribuir fórmulas incorrectas a un gran número de sustancias. En efecto, según dicha hipótesis, el agua debería tener la fórmula HO (incorrecta), en lugar de H₂O; el amoníaco debería ser NH

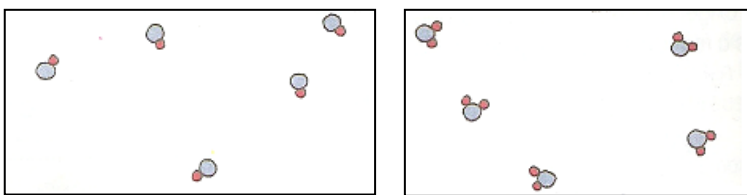
(incorrecta), en lugar de NH_3 ; etc. Igual ocurre con un gran número de elementos, como, por ejemplo el nitrógeno gaseoso, al que, según las hipótesis de Dalton, habría que atribuir la fórmula, N (incorrecta), en lugar de la fórmula correcta, N_2 .

No únicamente la regla de máxima simplicidad, sino prácticamente todas las hipótesis de Dalton fueron sufriendo modificaciones, algunas sustanciales. Excepto la primera, hoy no se acepta ninguna de ellas en la forma en que Dalton las formuló: Ni la inmutabilidad de los átomos, ni la constancia de la composición, ni aún menos, como acabamos de ver, la regla de máxima simplicidad pueden hoy sostenerse. No obstante, como se irá viendo en las páginas siguientes de esta sección y en otras secciones dedicadas a profundizar en el estudio de la estructura atómica de la materia, estas modificaciones no han significado una ruptura radical con las propuestas de Dalton, sino una profundización y enriquecimiento del mismo esquema conceptual.

DESARROLLO DE LA TEORÍA ATÓMICO-MOLECULAR

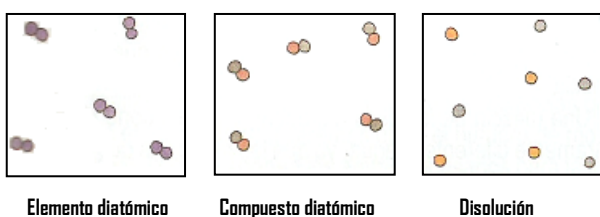
Prescindiendo de la regla de máxima simplicidad, la Teoría atómico-molecular de Dalton puede interpretar de forma solvente un gran número de hechos referidos a la estructura de la materia, la estructura de las sustancias y las reacciones químicas.

En primer lugar, la existencia de un número reducido de elementos indica que hay un número limitado de átomos diferentes y una limitada posibilidad de formar sustancias simples distintas a partir de un solo tipo de átomos (actualmente se conocen 118 átomos diferentes, pero poco más de 50 existen en la Tierra en cantidades apreciables).



Sin embargo, son ilimitadas las posibilidades de combinación de los 118 átomos distintos formando moléculas diferentes. [por ejemplo, con sólo dos átomos, A y B, se podrían plantear los compuestos AB (representado en el dibujo más a la izquierda), AB_2

(representado en el otro dibujo), A_2B , A_2B_2 , AB_3 , etc.] Con el conocimiento químico con que se cuenta hasta ahora, poco se puede adelantar sobre la viabilidad de algunas de estas combinaciones.



Otro aspecto que se visualiza con mucha claridad mediante dibujos inspirados en la Teoría atómica de Dalton es el de las formas como se presenta estructurada la materia. En general, los materiales se encuentran mezclados y no formando sustancias puras completamente aisladas. Tal como muestran los dibujos adjuntos, las

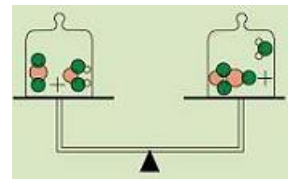
representaciones de porciones de gas inspiradas en el la teoría de Dalton ayudan a aclarar conceptualmente la diferencia entre una sustancia pura (puede ser un elemento o un compuesto) y una disolución formada por varias sustancias.

Estos conceptos son coherentes con el hecho de que los componentes de una mezcla o una disolución (mezcla homogénea) se han de poder separar mediante procedimientos físicos (como, por ejemplo, una destilación, una filtración, etc.). Sin embargo, para obtener sustancias puras simples (elementos) a partir de otras sustancias puras "complejas" (compuestos) se requiere una reacción química (llamada, en este caso, análisis). En dicha reacción se han de separar los átomos que componen las moléculas de los elementos (si no son monoatómicos) y luego formarse las moléculas del compuesto.

Generalizando estas ideas, afirmamos que toda reacción química requiere la ruptura de los enlaces entre los átomos de las moléculas existentes al inicio o reactivos, y un reagrupamiento de las mismas para componer las moléculas de las sustancias finales o productos de la reacción. Así se representa en el dibujo adjunto referido a la reacción de síntesis del hidrógeno (H_2) y el oxígeno (O_2) para obtener agua (H_2O).



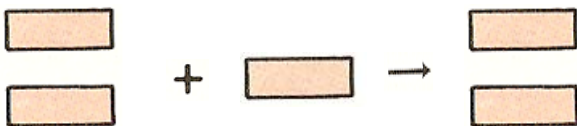
Estos desarrollos también apoyan las leyes ponderales de las reacciones químicas. Es evidente que, puesto que las moléculas de un compuesto están formadas por un número fijo de átomos de cada uno de los elementos en los que se puede descomponer, se tiene que verificar la ley de las proporciones simples y también la ley de las proporciones múltiples. También es evidente que se ha de cumplir el principio de conservación de la masa, ya que, según ilustra el dibujo adjunto, los átomos de las sustancias iniciales que intervienen en una reacción (reactivos) son los mismos (reagrupados de otro modo) de las sustancias finales (productos).



COMBINACIONES ENTRE GASES. HIPÓTESIS DE AVOGADRO

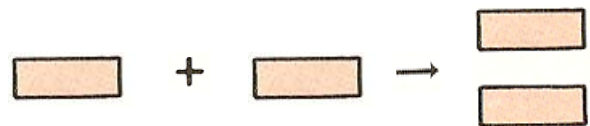
En el tema dedicado al modelo cinético-corpúscular de la materia nos hemos referido a los trabajos de Gay Lussac sobre la variación de los volúmenes gaseosos con la temperatura. Gay Lussac prosiguió sus investigaciones acerca del comportamiento de los gases estudiando los volúmenes de los gases que intervienen en las reacciones químicas. Observó que los volúmenes de los gases, tanto reactivos como productos, estaban entre sí en una relación muy sencilla, si la condiciones de presión y temperatura eran la mismas. Así por ejemplo:

En la síntesis del agua



2 volúmenes de hidrógeno + 1 volumen de oxígeno \rightarrow 2 volúmenes de agua

En la síntesis del cloruro de hidrógeno



1 volumen de hidrógeno + 1 volumen de cloro \rightarrow 2 volúmenes de cloruro

En todos los casos, los resultados experimentales indicaban que *al reaccionar los gases en las mismas condiciones de presión y temperatura, se combinan siguiendo relaciones volumétricas muy sencillas*, enunciado que se conoce como **ley de las relaciones volumétricas**. Teniendo en cuenta esta ley, el científico italiano Avogadro (1776-1856) formuló la siguiente hipótesis: *Volúmenes iguales de cualquier gas, en las mismas condiciones de presión y temperatura, contienen el mismo número de moléculas*.



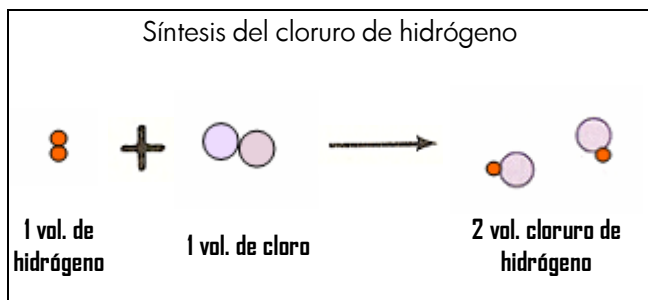
Con la formulación de esta hipótesis, Avogadro abrió el camino a una interpretación de las reacciones adecuada para atribuir una fórmula química correcta a las sustancias y también a la obtención de masas atómicas y moleculares de las sustancias. En el tema dedicado al modelo cinético-corpúscular de la materia hemos visto la ley de los gases ideales, que expresa la siguiente relación entre las cuatro variables macroscópicas termodinámicas que determinan el estado del gas:

$$P = \frac{k \cdot N \cdot T}{V}$$

DETERMINACIÓN DE MASAS ATÓMICAS Y MASAS MOLECULARES RELATIVAS

La interpretación de los datos volumétricos a la luz de la hipótesis de Avogadro permitió obtener fórmulas correctas de muchos elementos y compuestos, evitando la regla de máxima simplicidad. Adicionalmente, la combinación de estos conocimientos con los resultados del análisis químico también sirvió para obtener masas atómicas y masas moleculares relativas.

Veamos, como ejemplo, la reacción de síntesis del cloruro de hidrógeno, representada en el esquema adjunto. Los resultados experimentales sobre esta reacción informan de que cada gramo de hidrógeno reacciona con 35.5 gramos de



cloro. Por tanto, como las moléculas de cloro y de hidrógeno son ambas di-atómicas, se deduce que cada átomo de cloro debería tener una masa 35.5 veces mayor que el de hidrógeno. La realidad es un poco más complicada. En la naturaleza se encuentran dos isótopos estables de cloro: uno 35 veces y el otro 37 veces más masivo que el hidrógeno. Estos isótopos tienen unas proporciones relativas de 3:1

respectivamente, lo que da el resultado de una masa atómica relativa para el cloro de 35.5. De los datos de la esta reacción también se deduce la obviedad de que la molécula de hidrógeno gaseoso (H_2) tiene una masa doble que la del átomo de hidrógeno y que la molécula de cloruro de hidrógeno (HCl) debería tener una masa 36.5 ($35.5 + 1$) veces mayor que la del átomo de hidrógeno.



Cannizzaro (1826 - 1910)

Dalton (entre 1803 y 1805), y Berzelius (entre 1808 y 1826), fueron los primeros en determinar masas atómicas y masas moleculares relativas de bastantes elementos conocidos. Dichas masas fueron definidas inicialmente en relación al elemento más ligero, el hidrógeno, al que se atribuyó en esta escala de masas relativas el valor 1. Posteriormente Cannizzaro (1826 - 1910) refinó estos conceptos aplicando la hipótesis de Avogadro. En un Congreso celebrado en Karlsruhe en 1860, formuló la siguiente ley para determinar las masas atómicas de los elementos: *las distintas cantidades del mismo elemento contenido en distintas moléculas son todas múltiplos enteros de la masa atómica.*

Cannizzaro determinó experimentalmente masas atómicas y masas moleculares comparando la densidad de vapor de un conjunto de gases con moléculas conteniendo uno o más del elemento químico en cuestión.

Sobre la base de estos hallazgos y hasta mediados del siglo XX, los químicos y físicos utilizaron dos escalas de masa atómicas relativas. Los químicos usaban una escala tal que la mezcla natural de isótopos de oxígeno tenía una masa atómica de 16, mientras que los físicos asignaron el mismo número 16 a la masa atómica del isótopo de oxígeno más común (oxígeno-16). Como en el oxígeno natural están presentes el oxígeno-17 y el oxígeno-18, esto conducía a 2 tablas diferentes de masas atómicas relativas.

Entre 1959 y 1960 ambas organizaciones acordaron una escala unificada, basada en el carbono-12 (el carbono-12 es el más abundante de los dos isótopos estables del elemento carbono, representando el 98,89% de todo el carbono terrestre). Esta escala cumplía el requerimiento de los físicos de basar la escala en un isótopo puro y a la vez se hacía numéricamente cercana a la escala de los químicos. Atendiendo a esta escala unificada se define:

Masa atómica relativa: Número que indica cuántas veces mayor es la masa de un átomo con respecto a $1/12$ de la masa del isótopo del C-12.

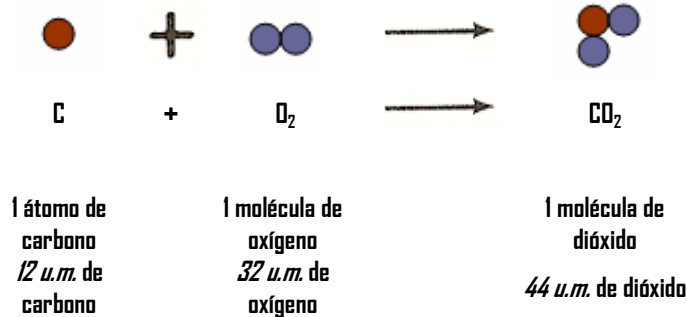
Masa molecular relativa: Número que indica cuántas veces mayor es la masa de una molécula de una sustancia con respecto a $1/12$ de la masa del isótopo del C-12. Se puede determinar sumando las masas atómicas relativas de los elementos cuyos átomos constituyen una molécula de dicha sustancia.

La unidad de masa atómica relativa y de masa molecular relativa se llama Dalton o unidad de masa atómica y se abrevia u (antes uma).

LA CANTIDAD DE SUSTANCIA Y SU UNIDAD EL MOL

Una vez establecido el concepto de masa atómica y que la reacción química es una combinación átomo a átomo, interesa encontrar un procedimiento práctico y sencillo para manejar el gran número de partículas que intervienen en una

Combustión del carbono



reacción. La solución estriba en adoptar un múltiplo adecuado del número de partículas. Para verlo, nos fijamos en la reacción de combustión de carbono, representada en el cuadro adjunto. Es evidente la relación escrita entre el número de moléculas de reactivos y de productos que intervienen: cada átomo de carbono que reacciona lo hace con una molécula de oxígeno, para producir una molécula de dióxido de carbono. Por otra parte, como la masa molecular del oxígeno es 32, la molécula de oxígeno (O₂) tiene una masa 32 veces mayor

que $1/12$ de la masa del átomo de carbono (C). De acuerdo con la hipótesis de Avogadro, esto significa que cada 32 unidades de masa *u.m.* (pueden ser *u, g, Kg,..*) de oxígeno (O₂) que reaccionan, lo hacen con 12*u.m.* de carbono (C). El mismo razonamiento conduce a establecer que cuando se consumen estas cantidades de reactivos, se obtienen 44*u.m.* de dióxido de carbono (CO₂).

Por otra parte, con independencia de cuál sea la unidad de masa escogida para medir estas cantidades, sabemos que 12 unidades de masa del carbono tienen un múltiplo igual de átomos, que moléculas hay en las 32 unidades de masa de oxígeno que reacciona con dicho carbono y, también, que moléculas se obtienen por las 32 unidades de masa de dióxido.

Teniendo en cuenta estos conceptos, primero la IUPAP (International Union of Pure and Applied Physics) en el año 1957 y 10 años después la IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry), introdujeron **el mol** para indicar cantidades de materia que contienen un múltiplo igual de moléculas, átomos o cualquier otra especie y lo definieron del siguiente modo: La definición del mol conlleva que un mol de cualquier materia tiene el mismo número de partículas o entidades.

El mol es la cantidad de sustancia de un sistema que contiene tantas entidades elementales como átomos hay en 0,012 kg de carbono – 12. Al emplearse el mol se debe especificar el tipo de entidades elementales; estas pueden ser átomos, moléculas, iones, electrones u otras entidades o grupos especificados de tales entidades.

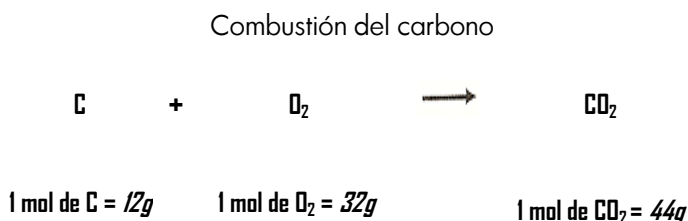
En 1971 la XIV Conferencia Internacional de Pesas y Medidas estableció el **mol** como la **séptima unidad básica del Sistema Internacional** de unidades y llamó **cantidad de sustancia** o **cantidad química** a la magnitud cuya unidad es el mol. Así pues, un mol de cualquier materia tiene el mismo número de partículas o entidades. De acuerdo con las mejores medidas este número es $6.0225 \cdot 10^{23}$ y recibe el nombre de **número de Avogadro**.

Con el concepto de mol en la mano, conviene expresar la ley de los gases ideales, indicando la cantidad de gas en número de moles, n , en vez de por el número de partículas, N :

$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T \text{ (la constante } R \text{ vale } 0.082 \text{ atm} \cdot \text{l/mol} \cdot \text{°K)}$$

Así pues, un mol de cualquier gas, en las mismas condiciones de presión y temperatura, además de tener el mismo número de partículas, ha de ocupar el mismo volumen. En las llamadas *condiciones normales* (fijadas a 25°C de temperatura y 1atm de presión) este volumen son 22.4 litros.

Estos conceptos facilitan el planteo de cálculos estequiométricos a partir del conocimiento de la fórmula química y de las masas atómicas y/o moleculares de las sustancias involucradas en una reacción. La estequiometría es la parte de la química dedicada al cálculo de las relaciones cuantitativas entre reactivos y productos en el transcurso de una reacción.



En el cuadro adjunto se expresan estas sencillas relaciones, referidas únicamente a unidades de masa y de cantidad de sustancia, para el ejemplo que hemos comentado aquí, correspondiente a la combustión del carbono.

EL NÚMERO DE AVOGADRO Y LA DEFINICIÓN DE KILOGRAMO

Este número es una constante universal y de acuerdo con las mejores medidas actuales vale $6.02214078 \cdot 10^{23}$. Recibe el nombre de número de Avogadro o constante de Avogadro, **N_A**.

Fue el físico francés Perrin (1870-1942) quien propuso en 1909 dar el nombre de Avogadro a esta constante. Con ello quiso que se reconociera que la hipótesis de Avogadro había abierto un siglo antes el camino por el que se pudo establecer un vínculo cuantitativo entre la masa de cada sustancia y el número correspondiente de entidades elementales (átomos, iones, moléculas,..) que la componen. Perrin determinó la constante de Avogadro con precisión mediante varios métodos diferentes. También estudió con detalle los rayos catódicos y modificó el modelo de Thomson. Por este conjunto de contribuciones recibió el premio Nobel de Física en 1926.

Seguidamente se exponen los principales métodos utilizados para calcular el número de Avogadro.

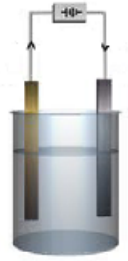
Estimación del volumen de las moléculas de aire

El primer intento de obtener el número de Avogadro lo realizó Loschmidt (1821-1895). Trabajando sobre la teoría cinética de los gases, calculó por vez primera el tamaño de las moléculas del aire. Con ese valor estimó erróneamente el número de moléculas que hay en un centímetro cúbico de aire. Este resultado de la densidad numérica de partículas en un gas ideal se llama en su honor constante de Loschmidt y es aproximadamente proporcional a la constante de Avogadro.

Coulombimetría

El primer método preciso de medir el valor de la constante de Avogadro se basó en medir la carga eléctrica transportada por un mol de electrones (se llama constante de Faraday, F) y dividir por la carga elemental, o carga del electrón, e : $N_A = F/e$.

El experimento, realizado en el NIST (Instituto Nacional de Estándares y Tecnología), utiliza una cuba electrolítica con ánodo de plata y mide la masa de plata, depositada durante un tiempo, después de conectar la cuba a una corriente eléctrica. El valor de la constante de Faraday depende de estas magnitudes, medibles en el experimento, y de la masa atómica de la plata.



Una dificultad a superar es el hecho de que en el proceso se pierde plata en el ánodo por razones mecánicas (los investigadores del NIST desarrollaron un ingenioso método para compensar la plata perdida por este motivo). Otra, de carácter más fundamental, procede del hecho de que la plata natural contiene una mezcla de dos isótopos (Ag-107, Ag-109). No se puede asegurar con total exactitud, el porcentaje en que se deposita de uno y otro, por lo que se requiere realizar un análisis isotópico de la plata utilizada para determinar el peso atómico apropiado. El método de la masa de electrones consiste en expresar la constante de Avogadro en función de la masa del electrón (en reposo).

Método de la masa de electrones

Teniendo en cuenta que el procedimiento experimental requerido para determinar dicha masa del electrón implica expresarla a su vez en función de otras cuatro constantes físicas (la constante de Rydberg, la velocidad de la luz, la constante de estructura fina y la constante de Planck), la precisión de la constante de Avogadro, depende a su vez de la precisión en la determinación de dichas constantes.

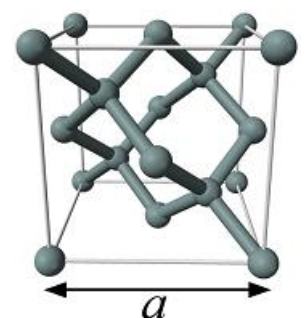
Constante	Valor 2006	Incertidumbre estándar relativa	Coefficiente de correlación con N_A
Masa atómica relativa del electrón	$5.485\,799\,0943(23) \cdot 10^{-4}$	$4.2 \cdot 10^{-10}$	0.0082
Masa molar	0.001 kg/mol	definida	—
Constante de Rydberg	$10\,973\,731.568\,527(73) \text{ m}^{-1}$	$6.6 \cdot 10^{-12}$	0.0000
Constante de Planck	$6.626\,068\,96(33) \cdot 10^{-34} \text{ Js}$	$5.0 \cdot 10^{-8}$	-0.9996
Velocidad de la luz	299 792 458 m/s	definida	—
Constante de estructura fina	$7.297\,352\,5376(50) \cdot 10^{-3}$	$6.8 \cdot 10^{-10}$	0.0269
Constante de Avogadro	$6.022\,141\,79(30) \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$	$5.0 \cdot 10^{-8}$	1

En la tabla adjunta se expresan los valores oficiales (CODATA 2006) de estas constantes y del resto de magnitudes que intervienen en este cálculo. El principal factor que limita la precisión con la que se determina

el valor de la constante de Avogadro por este procedimiento es la imprecisión en el valor de la constante de Planck, puesto que el resto de valores que contribuyen al cálculo se conocen con mucha más precisión.

Método de la densidad del cristal por rayos X

El método actual para calcular con la mayor exactitud posible la constante de Avogadro consiste en emplear cristalografía de rayos X sobre esferas de silicio altamente cristalinas. El número de Avogadro se obtiene a partir del cociente entre el volumen de un mol de silicio, $V_m(\text{Si})$, (conocido a partir de su masa) y el de una única celda unitaria del cristal, V_{celda} , cuya longitud, a , se determina mediante experimentos de difracción de rayos X.



$$N_A = \frac{8 \cdot V_m(\text{Si})}{V_{\text{celda}}}$$

El factor ocho tiene en cuenta que hay ocho átomos de silicio en cada celda unidad. La principal dificultad en este método, está en obtener un cristal de silicio con una composición isotópica muy pura. Hay que tener en cuenta que el Silicio presenta tres isótopos estables Si-28, Si-29 y Si-30 y la variación natural en sus proporciones aporta incertidumbre en la medición del número de átomos.



La determinación precisa del número de Avogadro es hoy un asunto importante para la investigación científica. Una de las razones es que de ello depende el poder actualizar la definición de la única unidad básica del Sistema Internacional que todavía depende de un patrón: el kilogramo (el prototipo se conserva en la cámara acorazada de la Oficina Internacional de Pesas y Medidas, en Sèvres, cerca de París).

Recientemente se ha detectado una pérdida de peso en el prototipo (del orden de 50mg), de modo que resulta cada vez más necesario cambiar la definición de kilogramo. Tal cambio no es sencillo y ahora depende, precisamente, de la posibilidad de determinar con muy alta precisión la constante de Avogadro. Con este motivo, se inició en 2003 el proyecto Avogadro. Varios institutos nacionales de metrología, coordinados por el Instituto Federal de la Física y de la Técnica de Asuntos Interiores (PTB, en alemán Physikalisch-Technische Bundesanstalt), junto con la Oficina Internacional de Pesos y Medidas, se propusieron obtener cerca de 5kg de Si-28 altamente enriquecido (99,99%) en un único cristal, con el objeto de emplearlo para medir la constante de Avogadro. Se purificó al 99,99% una muestra con la que se pulieron en Australia dos esferas de 1kg. Finalmente, después de determinar la densidad, los parámetros de su red cristalina y la calidad de su superficie de las esferas, se trazó un mapa de la superficie de cada átomo a fin medir su volumen mediante interferometría láser.



PROBLEMAS PENDIENTES. NUEVAS INVESTIGACIONES

La teoría atómico-molecular de la materia constituyó un modelo coherente muy adecuado para interpretar la estructura de las sustancias y las reacciones químicas, aunque, en seguida hubo que reconsiderar cada una de sus hipótesis y se plantearon nuevos interrogantes. Algunas cuestiones pendientes, son las siguientes:

1) ¿Cómo se produce la combinación entre átomos para formar moléculas?, ¿Cómo se rompen estas combinaciones y se producen otras nuevas en una reacción química?. ¿Por qué se pueden formar y se forman unas sustancias y no otras?

Estas cuestiones se tratan en el estudio del enlace químico.

2) ¿Cómo se compagina la electricidad de la materia con la estructura atómico-molecular?, ¿Como es que se emite radiación si los átomos son indivisibles e inmutables?

Éstas y otras cuestiones ponen en tela de juicio la supuesta indivisibilidad e inmutabilidad de los átomos y pueden ser acicate para el estudio de la estructura interna del átomo.