

ÁTOMOS Y MOLÉCULAS

Carlos F. Bunge

A pesar de que están en todas partes, de que sin ellos no podríamos ver, ni jugar, ni amar, ni pensar, ni empezar a entender al mundo, los átomos y las moléculas nunca han estado de moda en nuestro medio.

La fascinación y la excitación que causó el descubrimiento del electrón hace ya más de 90 años, la conmoción intelectual que sobrevino a la elucidación de la estructura electrónica de los átomos más simples, y el asombro y las polémicas con que fueron recibidos los primeros pasos hacia una comprensión de la estructura molecular, forman parte de una historia antigua, sin "valor de noticia". Además, la cultura latina es más receptiva de lo filosófico que de lo práctico, y dentro de lo filosófico se inclina más por lo inaccesible que por lo concreto. Así, será un relato sobre los tres primeros minutos del Universo, o una fantasía sobre la historia del tiempo, lo que absorberá la atención y la credibilidad del neófito. Los átomos y las moléculas parecieran ser demasiado reales para cautivar su imaginación.

No es que los átomos puedan verse o tocarse. Nunca nadie ha visto ni podrá ver un átomo en sentido literal ya que son muy pequeños, del orden de un Angstrom (un Angstrom es la cienmillonésima parte de un centímetro) y como discutiremos más adelante, los seres vivos estamos intrínsecamente limitados a un poder de resolución poco mayor a una micra, esto es, 10 000 Angstroms, y esto valiéndonos de un microscopio convencional de alta resolución.

El tamaño de los átomos empezó a conocerse con cierta confiabilidad desde 1904 cuando, en la Universidad McGill de Montreal, Rutherford midió el número de átomos de una pequeña muestra de helio, un gas inerte formado por átomos que poseen solamente dos electrones y que se acababa de descubrir. El gran científico neozelandés se la pasó nueve meses contando partículas alfa que producían un centelleo cada vez que una de ellas incidía en una pantalla de sulfuro de cinc.

Las partículas alfa son átomos de helio a los que se les han quitado sus dos electrones. En presencia de un gas, las partículas alfa se neutralizan, esto es, obtienen dos electrones para formar un átomo de helio, y Rutherford recogió estos átomos de helio y midió su volumen. La masa correspondiente se determinó a partir de la densidad conocida del helio gaseoso, que en el experimento mencionado no pudo determinarse directamente debido a la pequeñez de la muestra. De esta manera, Rutherford estableció que 4 gramos de helio tie-

nen, aproximadamente, 600 000 millones de billones de átomos, esto es, un 6 seguido de 23 ceros. Por razones históricas a este número se le conoce como número de Avogadro y se escribe $N(Av)$.

El lector ya habrá adivinado que, sabiendo cuántos átomos de helio hay en una masa dada de dicho gas, es posible calcular la masa de un átomo de helio, simplemente con dividir los 4 gramos por $N(Av)$, lo que da 6.7 dividido por un 1 seguido de 24 ceros. Usando notación científica, tenemos que un átomo de helio pesa $6.7 \cdot 10^{-24}$ gramos.

El valor de $N(Av)$ ha sido determinado por muchos otros métodos, y la concordancia entre los diversos resultados es una prueba tanto de la validez de las hipótesis que sustentan los diversos métodos (en el caso de Rutherford, la hipótesis de que cada centelleo correspondía a una sola partícula alfa y de que todas las partículas alfa producían un centelleo) como de la coherencia interna de la ciencia. A partir de $N(Av)$, de la densidad de un líquido o de un sólido, y suponiendo que en estos últimos los átomos están en contacto y sin sufrir deformaciones apreciables, es posible determinar que el tamaño aproximado de los átomos es de 1 Angstrom (entre 0.3 y 2 Angstroms, dependiendo del átomo y de su entorno).

Se llega a conclusiones análogas a partir de medidas del espaciamiento entre los planos de átomos en un cristal por medio de difracción de rayos X, realizadas por primera vez 11 años más tarde en Inglaterra por los Bragg (padre e hijo), o a partir de determinaciones directas de la masa del protón o de la masa de la partícula alfa.

Un átomo está formado por un núcleo de carga positiva y una nube de electrones con carga negativa. El núcleo atómico es relativamente pesado, y los electrones, siendo muy leves, circulan en derredor del núcleo a velocidades endemoniadas. Esta imagen fue dada por Rutherford en 1911, como resultado de la interpretación de sus experimentos de colisiones de partículas alfa con una lámina delgada de oro. Rutherford encontró que la mayoría de las partículas alfa pasaban a través sin alterar mayormente sus trayectorias, pero unas pocas no solamente eran desviadas sino que eran regresadas hacia atrás. Debido a la gran energía de las partículas alfa, era como si uno enviara una bala de cañón contra una cartulina y la bala saliera rebotada hacia atrás.

Suponiendo que toda la masa de los átomos de oro estaba concentrada en cargas positivas, Rutherford dedujo una fór-

mula que explicaba cuantitativamente sus resultados experimentales de dispersión de partículas alfa. Por su sencillez y sus alcances, este es uno de los resultados más bellos de toda la física. Decenas de miles de experimentos posteriores confirmaron y refinaron la hipótesis de Rutherford. En particular, la teoría cuántica de los átomos, que es la base de toda física atómica, descansa sobre dicha imagen del átomo.

En el laboratorio también se han hecho mediciones directas de la masa y de la carga del electrón, y de la masa del protón, que es 1836 veces mayor que la del electrón, y de su carga, que es igual a la del electrón pero de signo opuesto. Esto último puede parecer trivial, pero los físicos no piensan lo mismo: mediciones muy precisas de las cargas eléctricas relativas del protón y del electrón muestran que son iguales en magnitud, por lo menos, con una precisión de una parte en 100 millones de billones, esto es, un 1 seguido de 20 ceros. Las cargas de igual signo se repelen, y las de signo contrario se atraen, en ambos casos las fuerzas que intervienen tienen el mismo origen y son muy intensas. Por lo tanto, no es de extrañar que un electrón y un protón puedan combinarse para formar un átomo de hidrógeno. En este caso el protón hace de núcleo. El protón es el núcleo más simple, y el átomo de hidrógeno es el átomo más simple. La primera consecuencia importante del hecho de que las cargas del electrón y del protón sean iguales y de signo opuesto es que el átomo de hidrógeno es eléctricamente neutro.

El núcleo que sigue en complejidad es el deuterón, formado por un protón y un neutrón. El neutrón no tiene carga eléctrica, por lo tanto el protón y el deuterón tienen la misma carga. Además, la masa del neutrón es aproximadamente igual a la del protón, por lo tanto el deuterón tiene una masa aproximadamente el doble de la del protón. Un deuterón y un electrón pueden juntarse para formar un átomo de deuterio, llamado también hidrógeno pesado. Existe además un núcleo que posee un protón y dos neutrones, y que con un electrón puede formar el átomo de tritio. El deuterio y el tritio son variedades del hidrógeno y se los llama isótopos del elemento hidrógeno. Los isótopos de un elemento tienen núcleos con un número dado de protones pero difieren en el número de neutrones. Por ejemplo, los átomos de helio tienen principalmente núcleos con 2 protones y 2 neutrones, pero también tienen núcleos con solamente un neutrón, que corresponden a un isótopo de menor abundancia en la naturaleza.

La segunda consecuencia de que el protón y el electrón tengan cargas iguales y opuestas es que el número de electrones de un átomo es igual al número de protones de su núcleo. De esta manera, todos los átomos, al igual que el átomo de hidrógeno, son eléctricamente neutros. Por ejemplo, el átomo de helio, con un núcleo de 2 protones, tiene una nube electrónica compuesta de 2 electrones, y el átomo de hierro, con su núcleo de 26 protones, tiene una nube electrónica de 26 electrones.

Cuando se habla de átomos positivos se trata de "átomos ionizados", que han perdido uno o más electrones. No es que los electrones puedan perderse así no más; para removerlos de un átomo hay que darles una cierta energía, la energía

de ionización. Los átomos neutros también pueden ganar un electrón y transformarse así en iones negativos. A principios de los años 80, en el Instituto de Física se predijo la existencia de varios iones negativos. Experimentos posteriores en laboratorios de Suecia, Estados Unidos y Francia han venido confirmando la validez de dichas predicciones. Estos iones negativos tienen especial interés para fabricar láseres de longitudes de onda pequeñas.

Si, por algún motivo, se acumulan cargas de sentido opuesto en dos objetos separados por una aislante, y si la acumulación de carga pudiera continuar de manera indefinida, llegaría un momento en que ya sea el material aislante se volvería conductor, o los soportes que mantienen separados los objetos cederían a las poderosas fuerzas electrostáticas, obteniéndose como resultado final la neutralización de las cargas.

En gran escala, cuando la acumulación de cargas de sentido opuesto en las nubes y en la superficie de la Tierra es suficientemente grande, cae un rayo. La función del rayo es neutralizar las cargas, en este caso la nube no cae estrepitosamente hacia la Tierra debido a la viscosidad del aire, sino es el aire el que se hace conductor. Ya mencionamos que los electrones alrededor del núcleo forman una nube electrónica. Esta nube no tiene la estructura caótica de un gas sino que más bien está dispuesta en capas concéntricas que emanan desde el núcleo, como las capas de una cebolla, y dentro de cada capa la nube electrónica vuelve a parecerse a un gas, de ahí que se la considere una nube.

Los electrones de las capas internas son los que tienen mayor energía cinética (mayor velocidad, ya que la energía cinética depende del cuadrado de la velocidad) pero también son los que tienen una mayor energía potencial y esto es lo que los hace estar muy fuertemente amarrados al núcleo. A medida que las capas electrónicas se alejan del núcleo, los electrones que las pueblan tienen menos energía. Los electrones con menor energía son los que están en la última capa, la capa más externa. Dentro de cada capa los electrones se ubican en orbitales. Los orbitales son como una red de autopistas en un espacio tridimensional, donde los electrones pueden circular con mayor o menor facilidad, dependiendo de cada región del espacio. Un electrón en un orbital correspondiente a una capa dada tiene mayor probabilidad de encontrarse dentro de dicha capa que en las cercanías de las demás.

Además de carga y masa, tanto el electrón como el protón poseen un momento angular intrínseco que se llama espín. Como consecuencia del espín, ambas partículas poseen un momento magnético. En un campo magnético externo, el espín del electrón puede adquirir solamente dos orientaciones.

Un orbital no puede contener más de dos electrones, y tampoco puede haber más de un electrón con el mismo espín en un dado orbital: si un orbital está ocupado por 2 electrones, éstos tienen espines opuestos, correspondientes a las dos posibles orientaciones ya mencionadas. Se dice que los espines están apareados, o en un lenguaje más a tono con nuestra época, que los electrones en átomos y moléculas son heterosexuales, distribuyéndose en pares con espines opuestos. En presencia de un átomo vecino, los orbitales atómicos de la última capa se deforman y se combinan con los del otro átomo.

mo formando orbitales moleculares. Los electrones que se encuentran en estos orbitales moleculares pueden dar lugar a una ligadura química entre ambos átomos, en cuyo caso puede formarse una molécula diatómica estable si la energía cinética relativa de ambos átomos no es demasiado grande. También puede darse que los electrones en los orbitales moleculares menos energéticos establezcan una interacción débil, que puede ser atractiva o repulsiva.

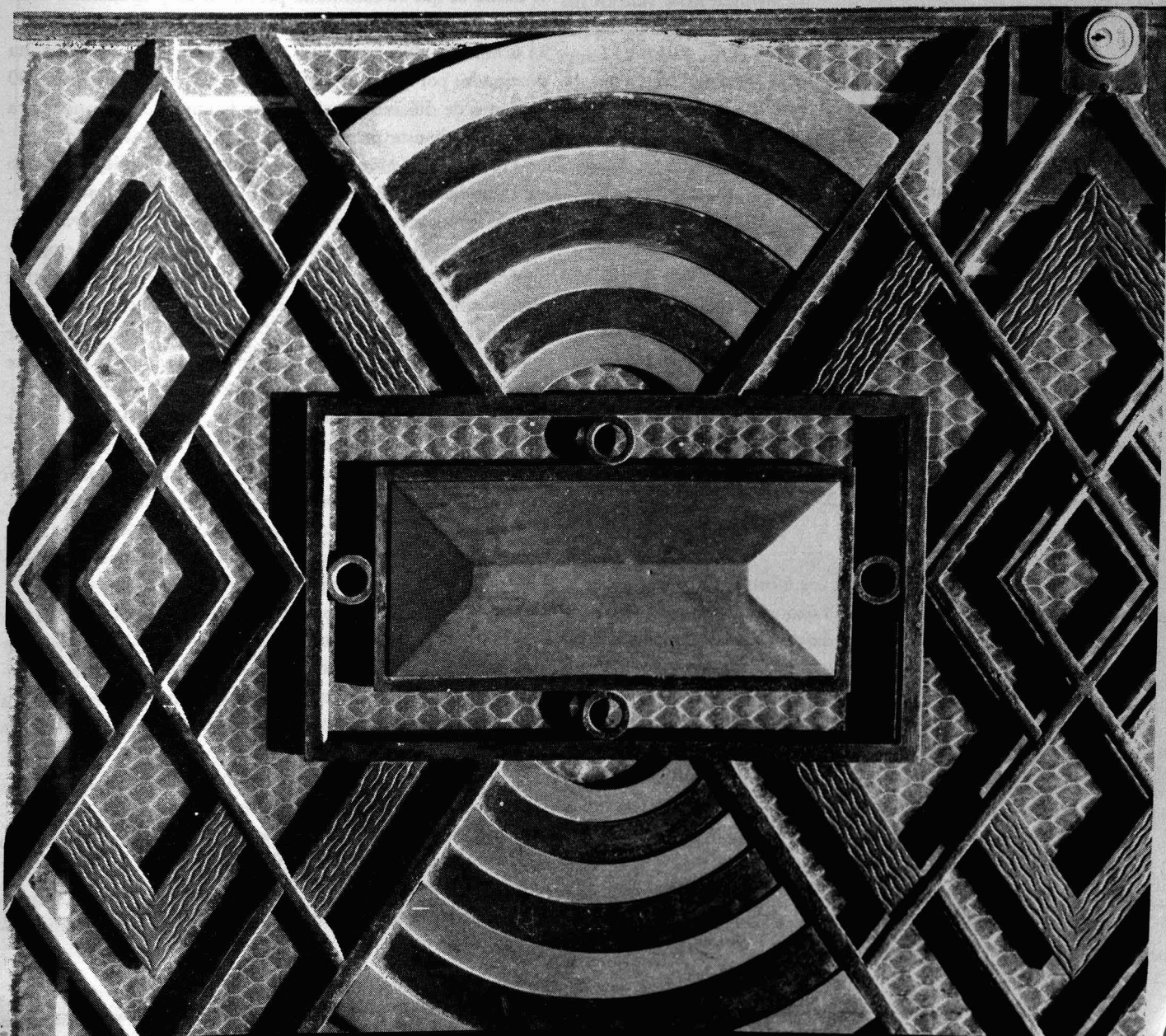
En el primer caso se trata de interacciones responsables por la licuefacción de los gases a bajas temperaturas, que son uno o más órdenes de magnitud inferiores a las que originan los enlaces químicos. En el caso de una interacción repulsiva, se forman moléculas de vida muy corta que tienen importancia en mecanismos de transferencia de energía.

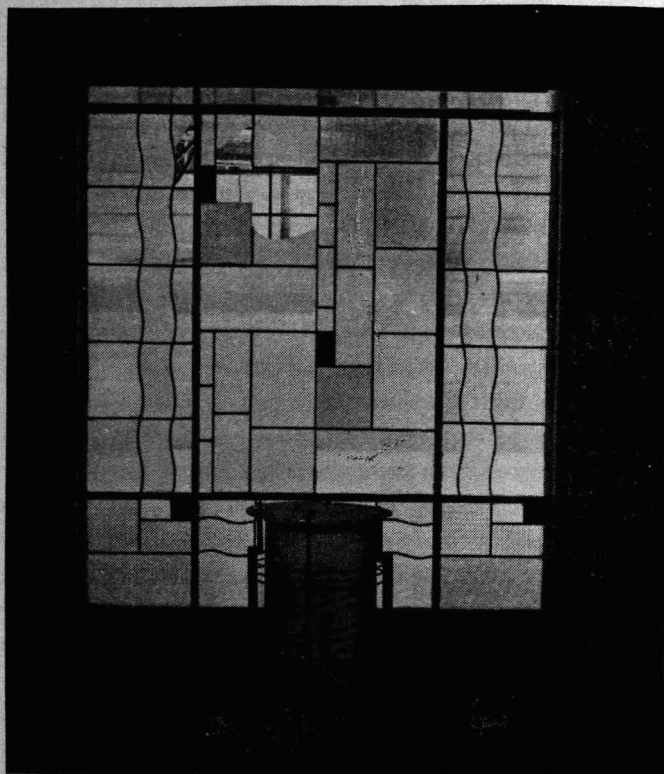
La valencia de un átomo es igual al número de electrones que participan en la formación de enlaces; un átomo puede enlazarse a uno o a varios átomos. Hemos visto que son los orbitales y electrones de la última capa, esos que tienen una menor energía, los que entran en juego cuando dos átomos se unen por medio de un enlace químico para formar una molécula. Por ello también se los llama orbitales y electrones de valencia.

Ya habíamos mencionado que existe un límite del poder de separación de detalles que podemos alcanzar con nuestra vista, el cual está dado por la longitud de onda de la luz visible, que es entre 4 000 y 7 500 Angstroms. No podremos ver con un detalle superior a los 3 000 Angstroms, ni ahora ni nunca, porque ninguna retina que se pueda concebir soportaría ser sometida a luz de longitud de onda inferior a 3 000 Angstroms. Por debajo de los 3 000 Angstroms, los fotones, que son las partículas que forman la luz, tienen energía suficiente para destruir a la mayoría de los enlaces químicos que mantienen unidos entre sí a los átomos de una molécula. En particular, estos fotones tan energéticos destruyen los enlaces de todas las moléculas orgánicas y son la causa de las quemaduras de sol cuando vamos a la playa.

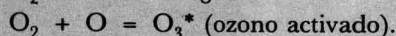
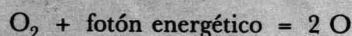
Estas líneas no podrían escribirse si no existiera una capa de ozono en la estratósfera (la región de la atmósfera por encima de los 17 km, donde no hay ni vientos ni lluvia) que absorbe la mayor parte de los fotones por debajo de 2 900 Angstroms, permitiendo que haya vida en la superficie de nuestro planeta.

El ozono es una molécula compuesta por tres átomos de oxígeno que se forma en la estratósfera, durante el día, a partir



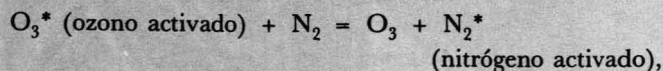


de moléculas de oxígeno y con ayuda de la luz solar, siguiendo los pasos que esquematizamos a continuación:



En el primer paso funciona como un generador de átomos de oxígeno: un fotón energético rompe una molécula de oxígeno en dos átomos de oxígeno. Los átomos de oxígeno son muy reactivos y enseguida se combinan con otra molécula de oxígeno para dar ozono activado. En el ozono activado, los átomos de oxígeno vibran muy agitadamente.

El ozono activado se desactiva por colisiones con moléculas de nitrógeno o de oxígeno:



para dar ozono normal, en el que los átomos de oxígeno vibran lo más lentamente posible. El ozono normal siempre se descompone espontáneamente en oxígeno molecular por medio de una variedad de mecanismos. Durante la noche el generador de átomos de oxígeno cesa de funcionar y el ozono desaparece gradualmente hasta el próximo día.

En la actualidad, la capa de ozono estratosférico está siendo destruida muy de prisa, debido a la llegada de los clorofluorocarbonos a la estratósfera, luego de más de 30 años de que comenzara su utilización comercial en aerosoles.

Los clorofluorocarbonos son moléculas muy simples, compuestas de un par de átomos de carbono, otro par de átomos de hidrógeno y algunos átomos de cloro y flúor. Estas moléculas forman un líquido que posee una gran presión de va-

por a temperatura ambiente (mayor que la presión atmosférica), para poder arrastrar la sustancia que se desea extraer de un recipiente, por ejemplo, un desodorante o una crema de afeitar. El problema es que, para no afectar la salud de los usuarios, los químicos buscaron compuestos que no fueran absorbidos por los organismos, y por lo tanto insolubles en agua.

Tan insolubles en agua son los clorofluorocarbonos que no se disuelven en los océanos y así, una vez que son liberados, se dispersan en la atmósfera y eventualmente, al cabo de algunas decenas de años, llegan en cantidades apreciables a alturas donde son descompuestos por los fotones energéticos produciendo átomos de cloro y de flúor. Estos átomos de cloro y de flúor son catalizadores muy efectivos para descomponer el ozono y permitir así que la radiación ultravioleta, dañina a la salud, llegue hasta nosotros.

Hace más de 15 años, Mario Molina, un químico mexicano que trabajaba en un grupo del Departamento de Química del Caltech en California, dio varias conferencias, algunas en México, alertando sobre el peligro que iban a representar los clorofluorocarbonos en la década siguiente. Quienes debieron haberlo escuchado no le hicieron caso, y el hecho es que se continúan produciendo y utilizando estas sustancias que están destruyendo la capa de ozono de manera dramática. Noruega, uno de los países más afectados, ha destinado, por ley, uno por ciento de su producto bruto (100 millones de dólares anuales) a un fondo internacional para el estudio de este problema.

Hoy también preocupan las grandes cantidades de ozono en la ciudad de México. Debido a la capa de ozono estratosférica, los fotones energéticos que allá arriba disociaban moléculas de oxígeno, aquí al nivel del suelo casi no llegan, y por ello la producción de ozono en la ciudad se debe a otros mecanismos. La acción combinada de la luz solar con agentes oxidantes como el dióxido de nitrógeno, y sobre todo de ciertos aditivos de la nueva gasolina que empezó a utilizarse desde hace unos años, han causado altos niveles de ozono.

El ozono es un gas aún más venenoso que el cloro que se usaba en la Primera Guerra Mundial. Su inhalación en cantidades apreciables, como las que se registran diariamente en el Valle de México, produce enfisema y probablemente induce el cáncer y la formación de sustancias cancerígenas. Así, no es exagerado afirmar que los habitantes del Distrito Federal estamos siendo gaseados.

En la actualidad se conocen unos cinco millones de moléculas distintas, la mayoría de las cuales son producidas por los organismos vivos, por lo que se las llama "moléculas orgánicas". Se sintetizan unas 500 nuevas moléculas todos los días, pero se conocen más o menos bien las estructuras de unas diez mil.

Se podrá decir que la física es difícil, que las matemáticas son incomprensibles, que la biología guácatelas, pero es frecuente que a la química se la odie sin pudor. Sin duda esto tiene que ver con lo que tratan de inculcar maestros anticuados y sin vocación. Porque si hay un mundo lleno de sorpresas y de cosas bellas e interesantes, ese es el mundo molecular. ♦