Capítulo 2

Gases o el modelo molecular más simple (y muy conveniente): una esfera

Breve reseña histórica

Históricamente, los trabajos científicos orientados al conocimiento de la materia, comenzaron con el estudio de los gases. La teoría atómico-molecular tiene su punto de partida con los estudios de *John Dalton* a comienzos del siglo XIX. A partir de sus trabajos y desarrollos ulteriores que tomaron como punto de partida las ideas de éste, es que tenemos la imagen de que los gases están compuestos por partículas en continua agitación y, por ende, chocando entre sí y con las paredes del recipiente que los contiene. Si no existiera tal recipiente continuarían moviéndose hasta que encontraran un obstáculo que las detuviera.

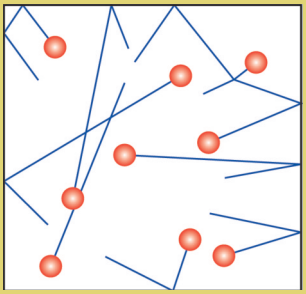


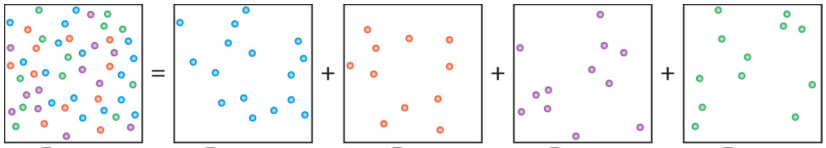
Figura 23. *Se representan en rojo las partículas que componen un gas confinado y en azul sus trayectorias. Como dijimos al final del capítulo anterior, el modelo que usó Dalton fue el de esferas que rebotan como bolas de billar unas con otras. Esta teoría explica, satisfactoriamente, las observaciones recopiladas en torno del comportamiento de los gases en un amplio rango de condiciones experimentales.*
Gracias a esta concepción de la materia, distintos aspectos medibles de los gases como presión, temperatura y volumen pudieron ser reunidos, coherentemente, en una formulación cuantitativa.
Esta teoría es conocida como teoría cinética de los gases.

"Comenzando a describir esas cosas llamadas gases"

Ley de Dalton y Ecuación General del Gas Ideal

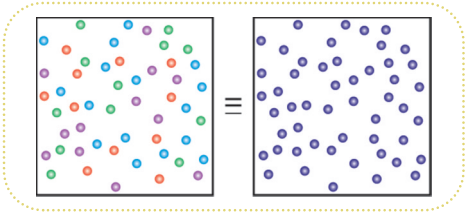
Una de las conclusiones más importantes de los experimentos con gases fue la ley que se enuncia, modernamente, como Ley de Dalton o Ley de las Presiones Parciales (1801); la cual establece que la presión total medida, en un ambiente confinado debida a la presencia de una mezcla de gases, es la suma de las presiones que ejercería cada componente de dicha mezcla si se encontrara solo.
En términos matemáticos: $P_t = P_1 + P_2 + \ldots + P_n$

Donde P_t representa la presión total medida y P_1 la presión del componente 1, P_2 la presión del componente 2 y, así, siguiendo hasta contabilizar **n** componentes.



$P_{total} = P_{celeste} + P_{rojo} + P_{violeta} + P_{verde}$

Si bien aquí distinguimos con colores a cada sustancia, desde el punto de vista de la presión todas las partículas son iguales a la hora de chocar con las paredes del recipiente.

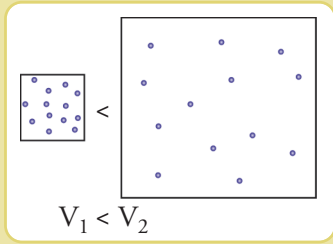


El hecho de poder generalizar observaciones en una expresión matemáticamente sencilla y general significó que fuera tomada como ley universal y, como tal, utilizada en distintas situaciones sin necesidad de verificar su validez para el caso particular de que se trate. Es decir, que podemos predecir la presión de una mezcla conocida de gases.

Esto lo podemos entender con una analogía física. Supongamos que nos pesamos en una balanza, esta marca un valor o sea nuestro peso (palabra "peso" está usada en sentido coloquial, para ser correctos, la balanza nos da un valor de nuestra masa entendida ésta como cantidad de materia). Si ahora subimos a la misma balanza junto con otra persona marcará un valor mayor que el primero, por supuesto. Podemos predecir el valor que marcará la balanza en el caso de que nuestro compañero suba solo. Lo calculamos como la resta del valor cuando subimos solos, al valor observado cuando subimos juntos. Podemos decir, en general, que si sabemos los pesos de cada persona podemos saber el peso de cualquier conjunto de personas que se pesen juntas. La ley de Dalton dice lo mismo, pero para presiones de gases en vez de personas y recipientes cerrados en vez de balanzas.

Tratemos de aplicar la ley de Dalton a un caso particular. Se desea conocer la presión total que ejercerá un mezcla de gases con la siguiente composición: nitrógeno 5 gramos, oxígeno 4 gramos e hidrógeno 1 gramo. Aquí aplicamos la ley de Dalton, es decir, sin necesidad de realizar, efectivamente, la mezcla de gases y medir la presión, podemos conocerla de antemano.

Pero ***¿están todos los datos presentes en la situación propuesta para dar una respuesta?, ¿será lo mismo que esta mezcla la realice en una botella de dos litros o en un tanque de 10 metros cúbicos?***



No, no da lo mismo el volumen donde se realice la mezcla. Tanto como no da lo mismo fumar en un ambiente cerrado y pequeño como hacerlo en un estadio cubierto. En el primer caso todo el humo del cigarrillo se reparte por el ambiente, pero seguimos detectando su presencia visualmente, en el segundo caso el humo se reparte en un espacio tan grande que nadie lo detecta.

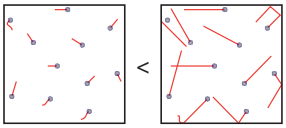
Elijamos un volumen en el cual realizar nuestra mezcla, supongamos un tanque rígido de acero de un compresor industrial de 3 metros cúbicos, el cual, mediante algún sistema (bomba de vacío, por ejemplo), hemos evacuado, es decir, hemos retirado toda la materia de su interior, todo el aire.

Preguntamos nuevamente, supongamos que hemos realizado nuestra mezcla, con respecto a la presión que mediremos,

¿será lo mismo si este tanque se encuentra a mediodía expuesto a la radiación solar que si se encuentra a la sombra?

No, no da lo mismo la temperatura del recipiente donde se realice la mezcla. Pensemos en un globo de cumpleaños, lo hemos inflado a la sombra y tiene un volumen determinado, si lo expo-

nemos al sol éste se hinchará e incluso podría explotar luego de un tiempo. Bien, podemos decir que el gas en su interior se ha expandido a expensas del calor recibido. Las partículas que forman el gas han ganado energía y se mueven más rápido y al chocar con la membrana del globo la deforman más.



Es decir que, por ahora, tenemos que: ***un conjunto de partículas que forman un gas pueden expandirse conforme aumentamos su temperatura y se expandirá tanto como para llenar, completamente, el recipiente que lo contiene.***

Siendo la presión la magnitud que da cuenta de la interacción de las partículas del gas con el recipiente y siendo esta interacción choques elásticos con las paredes, podemos enunciar que la presión:

1. ***aumenta con el aumento de la cantidad de partículas, sin importar el tipo, todas valen lo mismo, se señala esto con la letra "n".***
2. ***aumenta con el aumento de la velocidad de las partículas, por lo tanto aumenta la frecuencia de rebotes, esto está representado por la temperatura (T).***
3. ***aumenta con la disminución del volumen del recipiente o a la inversa, si aumenta el volumen disminuye la presión.***

En términos matemáticos: $\mathbf{P = \frac{n * T}{V}}$

Para homogeneizar las unidades de medida de la temperatura (medida en la escala absoluta de Kelvin –K–), volumen (metro cúbico –m^3–) y número de partículas (mol) esta ecuación, que se conoce como Ecuación General del Gas Ideal, se escribe así: $\mathbf{P = \frac{n * T * R}{V}}$

O más frecuentemente se la expresa sólo con multiplicaciones: $\mathbf{P * V = n * T * R}$

Donde R es una constante de proporcionalidad entre los productos P * V y n * T al ser expresados en la unidades de medida mencionadas. Esta constante es llamada constante universal de los gases. Su valor expresado en unidades: para presión atmósfera (atm), para volumen decímetro cúbico (dm^3), la cantidad de partículas siempre se mide en moles y la temperatura siempre en la escala absoluta de Kelvin[1] (K), es:

$$\mathbf{R = 0{,}082\ dm^3 * atm / mol * K.}$$

Con esta ecuación podemos resolver nuestro problema de encontrar la presión que ejercerán los 5 gramos de nitrógeno, 4 gramos de oxígeno y 1 gramo de hidrógeno si especificamos las circunstancias en las cuales se encuentran, esto es si fijamos el volumen y la temperatura en el cual se encontrarán.

Para simplificar las cuentas determinaremos que el volumen sea 1 metro cúbico, o escrito en forma abreviada 1 m^3 y la temperatura es de 25 grados centígrados, o escrito en forma

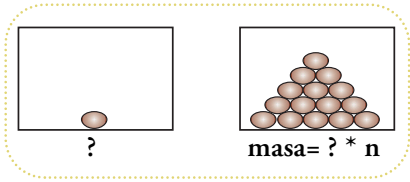
[1] La escala absoluta de temperatura es, en el fondo, una medida de la agitación molecular. Se dice que es absoluta porque en 0 K no hay movimiento alguno de las moléculas, por lo tanto, a diferencia de las escalas de temperaturas centígrada y de Fahrenheit no tienen sentido expresiones con signo negativo.

abreviada 25 °C. Antes de reemplazar los datos en la ecuación y despejar la incógnita (la presión –P–), debemos expresar la temperatura en la escala absoluta de Kelvin. Afortunadamente esto es muy sencillo ya que una temperatura en ºC se expresa en la escala absoluta (K) sumando 273,15, pero para nuestros fines usaremos números redondos, o sea 273. Es decir que en nuestro ejemplo 25 ºC ≡ (25 + 273) K = 298 K.

Bien, parecería que tenemos todo listo para resolver el problema de predecir la presión a la que se encontrará nuestra mezcla de gases, pero

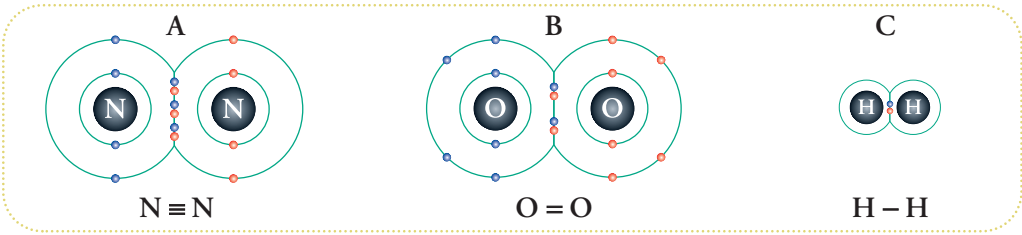
¿cuántas partículas representan estas masas de gases?, es decir ¿cuánto vale "n"?

Éste es un verdadero problema ya que no sabemos, hasta ahora, relacionar la masa de una sustancia con la cantidad de partículas que la forman, si supiéramos la masa de una de estas partículas, el cociente entre la masa total y la masa de una partícula única nos daría la cantidad de partículas que forman dicha masa total.



Aquí no profundizaremos en las investigaciones que llevaron a la formulación de un concepto capital de la química. Se trata del concepto de masa molar. Este concepto se enuncia de la siguiente manera, la masa molar de una sustancia es la masa de un mol de partículas de esa sustancia, sus unidades son gramos/mol. Un mol es un número con nombre propio por razones históricas, pero nada más complicado que entender que Π = 3,1415…, en este caso, mol representa el siguiente número: $6{,}022*10^{23}$, es decir 602.200.000.000.000.000.000.000, el cual se lee "seiscientos dos mil doscientos trillones".

La cantidad de partículas de gas (n) que interactúa con el recipiente es la cantidad total de moléculas. Como vimos en el capítulo 1, la molécula de nitrógeno (N_2) en el sistema de Lewis se representa como en la **figura A**, la molécula de oxígeno (O_2) se representa como en la **figura B** y la molécula de hidrógeno (H_2) se representa como en la **figura C**.



Estudios extensivos de las masas atómicas han sido realizados desde la época de *John J. Thomson*[2] a comienzo del siglo XX. Es posible encontrar los valores de masas atómicas como parte de la información de cada elemento de la tabla periódica.

En estos casos cada partícula de gas, o sea, cada molécula está formada por dos átomos del elemento correspondiente. Así la masa molar del nitrógeno molecular (N_2) es 28 g/mol ya que es dos veces la masa del átomo de nitrógeno (14 g/mol), del oxígeno molecular (O_2) es 32 g/mol ya que es dos veces la masa del átomo de oxígeno (16 g/mol) y del hidrógeno molecular (H_2) es 2 g/mol ya que es dos veces la masa del átomo de hidrógeno (1 g/mol).

[2] Sus trabajos fueron pioneros en explorar las masas atómicas utilizando la espectrometría de masa, es decir, la deflexión de haces moleculares por campos eléctricos y magnéticos.

Ahora, sí podemos despejar nuestro último valor desconocido; "n" es la suma de la cantidad de moléculas de cada gas.

Para el nitrógeno (N_2):

$n_{\text{moléculas de nitrógeno}} = 5\ g * (mol/28\ g) = 0{,}1786\ mol.$

Si bien hemos calculado una cantidad de partículas, dejaremos el resultado expresado de esta forma aunque, fácilmente, podemos calcular qué cantidad de moléculas de nitrógeno representa:

$0{,}1786\ mol = 0{,}1786 * 6{,}022 * 10^{23} = 1{,}0755 * 10^{23}$

Para el caso del oxígeno (O_2):

$n_{\text{moléculas de oxígeno}} = 4\ g *(mol/32\ g) = 0{,}1250$ mol de moléculas de oxígeno.

Podemos averiguar la cantidad total de moléculas de oxígeno como antes:

$0{,}1250\ mol = 0{,}1250 * 6{,}022 * 10^{23} = 0{,}7528 * 10^{23}$

Para el caso del hidrógeno (H_2):

$n_{\text{moléculas de hidrógeno}} = 1\ g * (mol/2\ g) = 0{,}5$ mol de moléculas de hidrógeno o sea:

$0{,}5\ mol = 0{,}5 * 6{,}022 * 10^{23} = 3{,}011 * 10^{23}$

Si aplicamos la Ecuación General del Gas Ideal en las condiciones de volumen y temperatura que fijamos (1 m^3 y 298 K) a cada uno de los conjuntos de partículas (moléculas de nitrógeno, oxígeno e hidrógeno) obtendremos la presión que ejercerá cada uno, si a este conjunto de resultados los tratamos bajo la ley de las presiones parciales (o Ley de Dalton) obtendremos, finalmente, nuestra respuesta.

Entonces, calculamos la presión que aporta el nitrógeno:

$$P_{\text{Nitrógeno}} * V = n * R * T$$
$$P_{\text{Nitrógeno}} = (n * R * T)/V$$
$$P_{\text{Nitrógeno}} = (0{,}1786\ mol * 0{,}082\ (dm^3 * atm / mol * K) * 298\ K)/1\ m^3$$
$$P_{\text{Nitrógeno}} = (0{,}1786\ mol * 0{,}082\ (dm^3 * atm / mol * K) * 298\ K)/1000\ dm^3$$
$$P_{\text{Nitrógeno}} = 0{,}0044\ atm$$

Calculamos la presión que aporta el oxígeno:

$$P_{\text{Oxígeno}} * V = n * R * T$$

$P_{Oxígeno} = (n * R * T)/V$
$P_{Oxígeno} = (0{,}1250 \text{ mol} * 0{,}082 (dm^3 * atm / mol * K) * 298 K)/1 m^3$
$P_{Oxígeno} = (0{,}1250 \text{ mol} * 0{,}082 (dm^3 * atm / mol * K) * 298 K)/1000 dm^3$
$P_{Oxígeno} = 0{,}0031 \text{ atm}$

Y calculamos la presión que aporta el hidrógeno:

$P_{Hidrógeno} * V = n * R * T$
$P_{Hidrógeno} = (n * R * T)/V$
$P_{Hidrógeno} = (0{,}5 \text{ mol} * 0{,}082 (dm^3 * atm / mol * K) * 298 K)/1 m^3$
$P_{Hidrógeno} = (0{,}5 \text{ mol} * 0{,}082 (dm^3 * atm / mol * K) * 298 K)/1.000 dm^3$
$P_{Hidrógeno} = 0{,}0122 \text{ atm}$

Aplicando la ley de presiones parciales, tenemos:

$$P_{Total} = P_{Nitrógeno} + P_{Oxígeno} + P_{Hidrógeno}$$

$$P_{Total} = 0{,}0044 \text{ atm} + 0{,}0031 \text{ atm} + 0{,}0122 \text{ atm} = 0{,}0197 \text{ atm}$$

La unidad de presión atm equivale a 1013 hPa (hecto Pascales), que es considerada la presión atmosférica normal a nivel del mar. De esta forma la presión calculada corresponde a casi el 2% de la presión atmosférica.

Si abriéramos la válvula que conecta nuestro recipiente, habría muchas más moléculas que entrarían que las que saldrían y observaríamos que, el medidor de presión, indicaría un incremento de presión hasta llegar a 1 atm ya que nuestro recipiente se llenó de partículas que estaban presentes en el exterior, o sea se llenó de aire.

Notemos que podemos verificar el resultado si aplicamos la Ecuación General del Gas Ideal y utilizamos como "n" la cantidad total de moléculas:

$P_{Total} * V = n * R * T$
$= (n * R * T)/V$
$= ((n_{moléculas\ de\ nitrógeno} + n_{moléculas\ de\ oxígeno} + n_{moléculas\ de\ hidrógeno}) * R * T)/V$
$= ((0{,}1786 \text{ mol} + 0{,}1250 \text{ mol} + 0{,}5 \text{ mol}) * R * T)/V$
$= (0{,}8036 \text{ mol} * R * T)/V$
$= (0{,}8036 \text{ mol} * 0{,}082 (dm^3 * atm / mol * K) * 298 K)/1 m^3$
$= (0{,}8036 \text{ mol} * 0{,}082 (dm^3 * atm / mol * K) * 298 K)/1.000 dm^3$
$= 0{,}0196 \text{ atm}$

Para resolver este problema no hemos utilizado ninguna representación especial de las moléculas de nitrógeno, oxígeno e hidrógeno, es decir no las hemos distinguido. Vale decir que fueron tratadas como partículas puntuales que sólo interactuarán con las paredes del recipiente que propusimos como contenedor de las mismas.

El mol

Sería bueno tener una idea lo más clara posible de la magnitud de la cantidad que representa un *mol*.

Supongamos que tenemos una cancha de fútbol a disposición y muchas, muchas, pero muchas pelotas de fútbol para trabajar, o sea, exactamente un mol de pelotas. La idea es la siguiente, comenzaremos por ubicar una pelota en un corner, al lado otra y así sucesivamente hasta llegar al otro corner, luego continuamos como se muestra en la **figura 24**. La cantidad de pelotas utilizadas dependerá de las dimensiones del campo de juego. Nuestra cancha de fútbol es la más grande que el reglamento permite. La distancia entre corners es de 90 metros y la distancia entre arcos es de 120 metros.

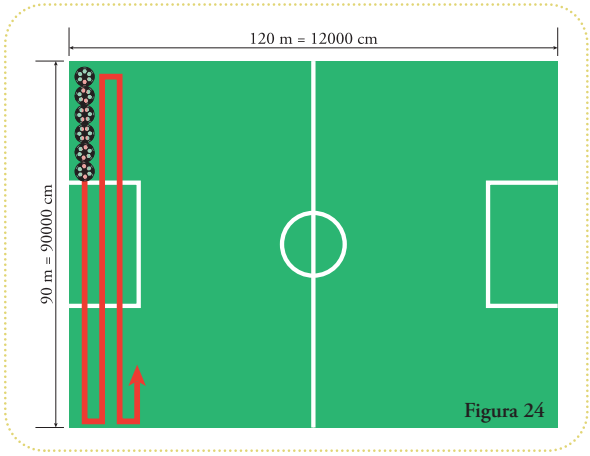
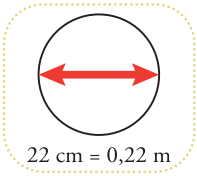


Figura 24

Una pelota de fútbol profesional tiene 22 centímetros de diámetro.



Con esta forma de ubicar las pelotas cubriremos la superficie con un rectángulo de:

9.000 cm / 22 cm = 409 pelotas en su lado menor y

12.000 cm / 22 cm = 546 en su lado mayor.

Toda la superficie será cubierta por apenas:

409 * 546 = 223.314 pelotas.

Las pelotas que aún no hemos ubicado debemos ponerlas encima.

Debemos conseguir cercos con la altura adecuada para transformar a nuestra cancha de fútbol en una gigantesca caja donde pondremos, capa tras capa (de 223.314 pelotas), todo el mol de balones. Cada capa tiene por supuesto 22 cm de alto o sea que si dividimos a $6{,}022 * 10^{23}$ por la cantidad de pelotas que tiene una capa obtendremos la cantidad de capas que tendremos que formar para ubicar un mol de pelotas.
Entonces:

$6{,}022 * 10^{23}$ / 223.314 = 2.696.651.351.908.075.624 capas.

Este resultado se lee dos trillones seiscientos noventa y seis mil seiscientos cincuenta y un billones trescientos cincuenta y un mil novecientos ocho millones setenta y cinco mil seiscientos veinticuatro capas de pelotas.

Cada capa tiene un espesor del diámetro de una pelota, o sea 22 cm, esto da que el alto de las caras de la caja que deseamos construir es de:

Altura = 2.696.651.351.908.075.624 * 22 cm
= 2.696.651.351.908.075.624 * 22 cm * (1 m / 100 cm)
= 2.696.651.351.908.075.624 * 0,22 m * (1 km / 1.000 m)
= 2.696.651.351.908.075.624 * 0,00022 km
= 2.593.263.297.419.776 km

Es decir, dos mil quinientos noventa y tres billones doscientos sesenta y tres mil doscientos noventa y siete millones cuatrocientos diecinueve mil setecientos setenta y seis kilómetros de alto. Muchos kilómetros.

La distancia de la Tierra al Sol son apenas 149.600.000 kilómetros. Esta distancia es conocida como Unidad Astronómica (UA). O sea que la altura de esta pila de pelotas en unidades astronómicas sería de 17.334.647,7 UA.

Es bastante conocida la velocidad de la luz, son 300.000 km por segundo. Y para distancias tan gigantesca se suele usar como unidad el año-luz (al) que equivale a la distancia recorrida por la luz en un año.

*Un minuto está formado por 60 segundos, la luz recorrerá 60 * 300.000 km = 18.000.000 km.*

*Una hora son 60 minutos de 60 segundos cada uno, o sea 3.600 segundos. Un día son 24 horas o 24 * 3.600 segundos = 86.400 segundos. En un día la luz recorre 86.400 * 300.000 km= = 2,592 * 10^{10} km = 25.920.000.000 o veinticinco mil novecientos veinte millones de kilómetros.*

*Un año está compuesto de 365 días de 86.400 segundos, o sea 365 * 86.400 segundos = = 31.536.000 segundos. O sea que en un año la luz recorre 31.536.000 * 300.000 km = = 9,4608 * 10^{12} km = 9.460.800.000.000 km o nueve billones cuatrocientos sesenta mil ochocientos millones de kilómetros, o sea:*

1 al = 9.460.800.000.000 km

Si hacemos el cociente entre la altura de nuestra pila y la distancia de un 1 *al*, expresado en kilómetros, obtenemos que la altura es de 274,1 *al*, aunque estaríamos bastante lejos del centro de la Vía Láctea que se encuentra, aproximadamente, 26.000 *al*.

La estrella más cercana al Sol es Próxima Centaury y se encuentra a 4,22 *al* de distancia.

Bien, fue bastante exagerado utilizar pelotas de fútbol como modelo de moléculas, por más que sean esferas que rebotan.

Seguro que obtendremos cosas más razonables si tratamos de cubrir la cancha de fútbol con granos de arena fina. El grano más pequeño de arena tiene un diámetro promedio de 0,0625 mm. Con 16 granitos puestos en fila cubrimos la distancia entre dos rayitas de una regla o sea 1 milímetro.

Si repetimos las cuentas tenemos que la superficie de la cancha la cubriríamos con el respetable número de $2{,}7648 * 10^{12} = 2.764.800.000.000$ o sea dos billones setecientos sesenta y cuatro mil ochocientos millones de granitos de arena, apenas una capa de polvo.
Ahora debemos agregar capas de esta cantidad de granitos de arena para juntar un mol de granitos y poder medir las tapas de la caja. Como antes cada capa tiene el espesor del diámetro de objeto que estamos agrupando, en el caso de la pelota de fútbol era de 22 cm, en este caso es de sólo 0,0625 mm. Si dividimos la cantidad que representa un mol por la cantidad de granitos de una capa, tendremos la cantidad de capas que necesitaremos agregar para ubicar un mol de granitos de arena en una cancha de fútbol.

Bien, entonces $\dfrac{6{,}022 * 10^{23}}{2{,}7648 * 10^{12}} = 217.809.606.482$

o sea doscientos diecisiete mil ochocientos nueve millones seiscientos seis mil cuatrocientos ochenta y dos capas, cada una con un espesor de 0,0625 mm. Multiplicamos el diámetro de un grano de arena por este número gigantesco y listo.

¿A qué altura llegará la pila?

¡Si pudiéramos juntar la cantidad de arena necesaria la pila llegaría a los 13.600 km! [3]

Es decir, que el grano de arena más pequeño, casi invisible a simple vista, resulta gigantesco comparado con las dimensiones moleculares.

Así, resulta increíble la cantidad de moléculas que manejamos todos los días, por ejemplo: al tomar un vaso de agua, aproximadamente, estamos tomando un quinto de litro, unos 200 mililitros. Dado que la densidad del agua es 1 gramo por mililitro, estamos ingiriendo 200 gramos de agua. Un mol de moléculas de agua pesan (la expresión correcta debería ser "tienen una masa de") 18 gramos. O sea, que estamos ingiriendo unos 11 moles de moléculas de agua (200 g / 18 g).

A la luz de estas magnitudes el dominio de los fenómenos atómicos y moleculares tiene totalmente justificado el nombre de microcosmos.

Volumen molecular

La contracara de la cantidad infinitamente gigantesca que representa un mol es lo infinitamente pequeño y liviano que resulta un átomo.

Por ejemplo:

masa de un átomo de hidrógeno = masa molar del átomo de hidrógeno / mol
= 1 g / 1 mol
= $1 \text{ g} / 6{,}022 * 10^{23}$
= $0{,}1661 * 10^{-23}$ g

Hemos visto en la presentación de la Ecuación General del Gas Ideal que el tamaño de la molécula no es tenido en cuenta y son tratados por igual el hidrógeno (H_2) (M = 2 g/mol) o ciclohexano (C_6H_{12}), 42 veces más pesado (M = 84 g/mol). Entonces, para consideraciones macroscópicas como la presión, temperatura y volumen de un gas es muy sensato no considerar el tamaño de las partículas y dado lo diminuto del tamaño sería bastante difícil hacerlo.

[3] Representa el 3.5 % de la distancia de la Tierra a la Luna.

Sin embargo, en la década de 1870 los trabajos de *Johannes Diderik Van der Waals* sentaron las bases que permitieron estimar a partir de distintos procedimientos experimentales (como propiedades mecánicas de los gases o análisis de difracción de rayos x) los radios atómicos de varios elementos.

Van der Waals planteó una modificación a la Ecuación General del Gas Ideal que tenía en cuenta la dimensión e interacción de los constituyentes de un gas.

Por tal contribución J. van der Waals recibió en 1910 un premio que había sido creado nueve años antes, el premio Nobel de Física.[4]

Como el modelo molecular que se utiliza en gases es una esfera sólida y rígida, un solo valor es necesario para describirla. Este valor es el radio, es la única distancia característica que se necesita para definir una esfera ya que las demás, como circunferencia, diámetro, superficie y volumen son el resultado de operaciones sobre éste (**Figura 25**).

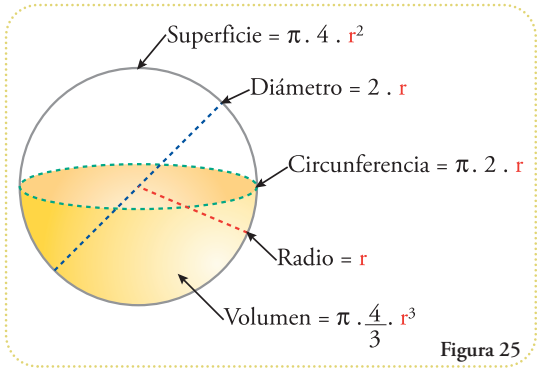


Figura 25

Estos son los valores consensuados para los radios de los átomos de los elementos más frecuentes en moléculas orgánicas (los valores están presentados en picómetros –pm–; 1 pm = 10^{-12} m):

Hidrógeno: 120 pm = $120 * 10^{-12}$ m
Carbono: 170 pm = $170 * 10^{-12}$ m
Oxígeno: 152 pm = $152 * 10^{-12}$ m
Nitrógeno: 155 pm = $155 * 10^{-12}$ m
Azufre: 180 pm = $180 * 10^{-12}$ m
Fósforo: 180 pm = $180 * 10^{-12}$ m

Estos valores representan los radios atómicos de los átomos libres y se los llama radios de Van der Waals.

La profundización en los estudios de la estructura molecular produjeron resultados que indican que, cuando dos elementos están formando un enlace covalente, la distancia entre sus núcleos es menor que la suma de sus radios de Van der Waals. Fue necesario definir lo que se llama radio covalente. En principio se puede estimar como la mitad de la distancia entre átomos de la misma clase, por ejemplo para el átomo hidrógeno se considera la mitad de la distancia entre los núcleos de la molécula H_2. Se puede hacer lo mismo para nitrógeno y el oxígeno. El método más utilizado para determinar los radios covalentes es la difracción de rayos x debido a que las formas cristalinas permiten obtener valores mucho más exactos de las distancias entre átomos.

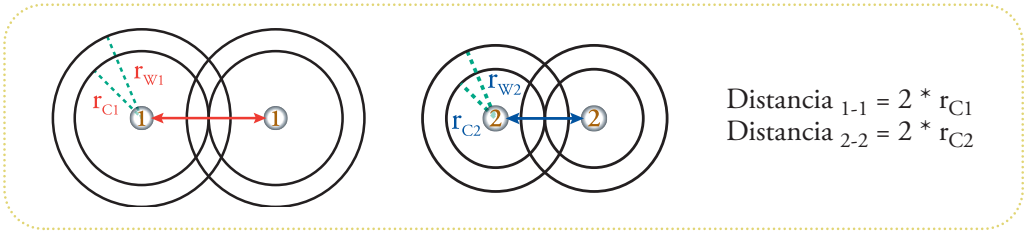
Estos son los valores de radios covalentes para los mismos átomos que antes[5]:

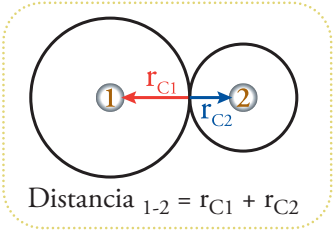
Hidrógeno: 37 pm = $37 * 10^{-12}$ m
Carbono, formando un enlace simple: 76 pm = $76 * 10^{-12}$ m

[4] Como lo obtuvieron también Ernest Rutherford (1908) y Niels Bohr (1922).
[5] Tomado de Beatriz Cordero, Verónica Gómez, Ana E. Platero-Prats, Marc Revés, Jorge Echeverría, Eduard Cremades, Flavia Barragán and Santiago Alvarez. Covalent radii revisited. Dalton Trans., 2008, 2832-2838.
Otra fuente interesante de información recopilada y ordenada para cada elemento es: http://periodictable.com/Properties/A/CovalentRadius.v.html

Carbono, formando un enlace doble: 73 pm = $73 * 10^{-12}$ m
Carbono, formando un enlace triple: 69 pm = $69 * 10^{-12}$ m
Oxígeno: 66 pm = $66 * 10^{-12}$ m
Nitrógeno: 71 pm = $71 * 10^{-12}$ m
Azufre: 105 pm = $105 * 10^{-12}$ m
Fósforo: 107 pm = $107 * 10^{-12}$ m

Se puede apreciar, claramente, que estos nuevos radios modelan a cada átomo como una esfera con un radio menor que el radio de Van der Waals (r_C : radio covalente, r_W : radio de Van der Waals):





Es posible estimar la longitud de un enlace covalente entre dos átomos distintos utilizando los radios covalentes de cada uno.

Como vimos al final del capítulo anterior, el modelo atómico contemporáneo describe la región que alberga la carga negativa como una región en el espacio donde la probabilidad de encontrar a un electrón es del 90% al 99%. Cuando se forma el enlace covalente estas regiones deben superponerse para poder compartir los electrones. Tal como lo contempla el modelo de Lewis de 1916. Como consecuencia de tal superposición es que los núcleos se acercan más que si, solamente, fueran puestos los átomos unos al lado de los otros. La mecánica cuántica explica también cómo esta superposición de orbitales genera orbitales híbridos de formas distintas a las que tenían los orbitales antes de que se produzca el enlace.
Sobre la forma molecular tridimensional hablaremos en el próximo capítulo.

Actividad

En todos los casos utilizar R = 0,082 (dm^3 * atm / mol * K)

1) Calcule la presión a la que se encuentra una mezcla de 10 gramos de oxígeno y 1 gramo de hidrógeno en 10 m^3 a una temperatura de 35ºC.
Datos: $M_{Oxígeno}$ = 32 g/mol, $M_{Hidrógeno}$ = 2 g/mol

2) Calcule el volumen que deberá tener un contenedor de 15 gramos de etano en un ambiente, cuya temperatura es 15ºC para que la presión sobre las paredes no sea mayor a las 2 atmósferas. Datos: la fórmula molecular del etano es C_2H_6.

3) Calcule la temperatura que debe tener un recipiente de 1 m^3 que contiene 1 kilogramo de nitrógeno para que la presión sea exactamente una atmósfera.

4) Calcule la masa de nitrógeno que debe agregarse a la siguiente mezcla: 6 gramos de oxígeno, 3 moles de hidrógeno y el contenido de un recipiente de 1 m^3 de propano a 25ºC a 1 atmósfera inyectado completamente junto a las otras dos sustancias, para que la presión se duplique, cuando la temperatura del tanque de 4 m^3 es de 0ºC.
Datos:
$M_{Oxígeno}$ = 32g / mol, $M_{Hidrógeno}$ = 2 g / mol, $M_{Nitrógeno}$ = 28g / mol, Fórmula molecular del propano: C_3H_8

5) Se presenta la siguiente situación: se inyectan 3 moles de la sustancia A en presencia de 5 moles de la sustancia B. Se produce la siguiente reacción: $A + 2B \rightarrow AB_2$. La temperatura final de la mezcla es 60ºC y el recipiente en el que transcurre la reacción es de 1 m^3. ¿Cuántos moles quedan de A, B y AB_2? ¿Cuál es la presión final? ¿Qué porcentaje de esta presión se debe a las partículas AB_2?

6) Se cuenta con el siguiente dispositivo: un recipiente rígido cilíndrico con una de sus tapas deslizante, con rozamiento despreciable y sin fugas por las juntas. La sección del cilindro es de 0,25 m^2. Calcule la distancia que se moverá la tapa si en un volumen inicial de un 1m^3 se produce la reacción completa de ruptura de A en dos partículas B + C a partir de 5 gramos de A. ¿Cuántos moles de partículas quedan al final de la reacción? El cilindro se encuentra a 70ºC y M_A = 79 g/mol.

7) Una vez resuelto el problema 6, si M_B = 44, ¿cuánta masa se obtiene de C?

8) Calcule la cantidad de moléculas de agua que pasan al aire luego de la combustión de un 1 kilogramo de madera. Considerar la siguiente aproximación: 90% de la masa de un trozo de madera es celulosa, un polímero de moléculas de glucosa.
Estas últimas con moléculas de las familia de las hexosas, con la siguiente fórmula química: $(H\text{-}C\text{-}OH)_6$, es decir que, $M_{glucosa}$ = (2 * 6 * 1 + 1 * 6 * 16 + 1 * 6 * 12) g/mol = 180 g/mol.
La combustión es la siguiente reacción: $(H\text{-}C\text{-}OH)_n + n\ O_2 \rightarrow n\ CO_2 + n\ H_2O$.

9) El nitrógeno en condiciones naturales en la corteza terrestre permanece en estado gaseoso. El nitrógeno es el 78,08% de la atmósfera medido en moles/unidad de volumen. Si realizáramos el siguiente experimento: considerando el aire de una habitación de 7 m x 3 m x 2,5 m a presión de una atmósfera y una temperatura de 20ºC, si pudiéramos condensar sólo el nitrógeno ¿qué volumen ocuparía este? Datos: la temperatura de condensación (pasaje de una sustancia del estado gaseoso al líquido) es de -196ºC, la densidad del nitrógeno líquido es de 0,707 g/ml.

10) Una vez resuelto el problema 9, calcule cuál sería la nueva presión dentro de la habitación debida a la mezcla empobrecida en nitrógeno si la temperatura no varió.