

# **TEMA 1**

## **Fundamentos de nanociencia y nanotecnología**

*Nanotecnología en Alimentos*

*OpenCourseWare*

*UPV/EHU OCW-2016*

*Idoia Ruiz de Larramendi*



# CONTENIDOS

- ❖ **Las nanoestructuras, la nanociencia y la nanotecnología**
- ❖ **La física cuántica: ¿ondas o partículas?**
  - La física clásica
  - La luz, ¿partículas u ondas?
  - La física cuántica
  - La radiación del cuerpo negro
  - El efecto fotoeléctrico
  - Ondas de materia
  - El principio de incertidumbre
- ❖ **Teoría atómica**
- ❖ **Estructura atómica**
- ❖ **Los átomos, las moléculas y los enlaces**
- ❖ **La nanotecnología y los alimentos**



# LAS NANOESTRUCTURAS, LA NANOCIENCIA Y LA NANOTECNOLOGÍA

## DOMINIO DE LA MATERIA A GRAN ESCALA

El ser humano, desde tiempos muy antiguos, ha realizado un gran esfuerzo en modificar su entorno natural para lograr que éste obre en su beneficio.



[Pirámide de Kukulcán](#) (México)

Fotografía de Juan Carlos García (Wikimedia Commons con licencia CC BY-SA 3.0)



[Pirámide de Menkaure](#) (Egipto)

Fotografía de Francesco Gasparetti (publicada en Wikimedia Commons con licencia CC BY 2.0)

Menos notorio, pero igual de importante, ha sido el avance del hombre para **conquistar la materia en el otro extremo de la escala.**



# LAS NANOESTRUCTURAS, LA NANOCIENCIA Y LA NANOTECNOLOGÍA

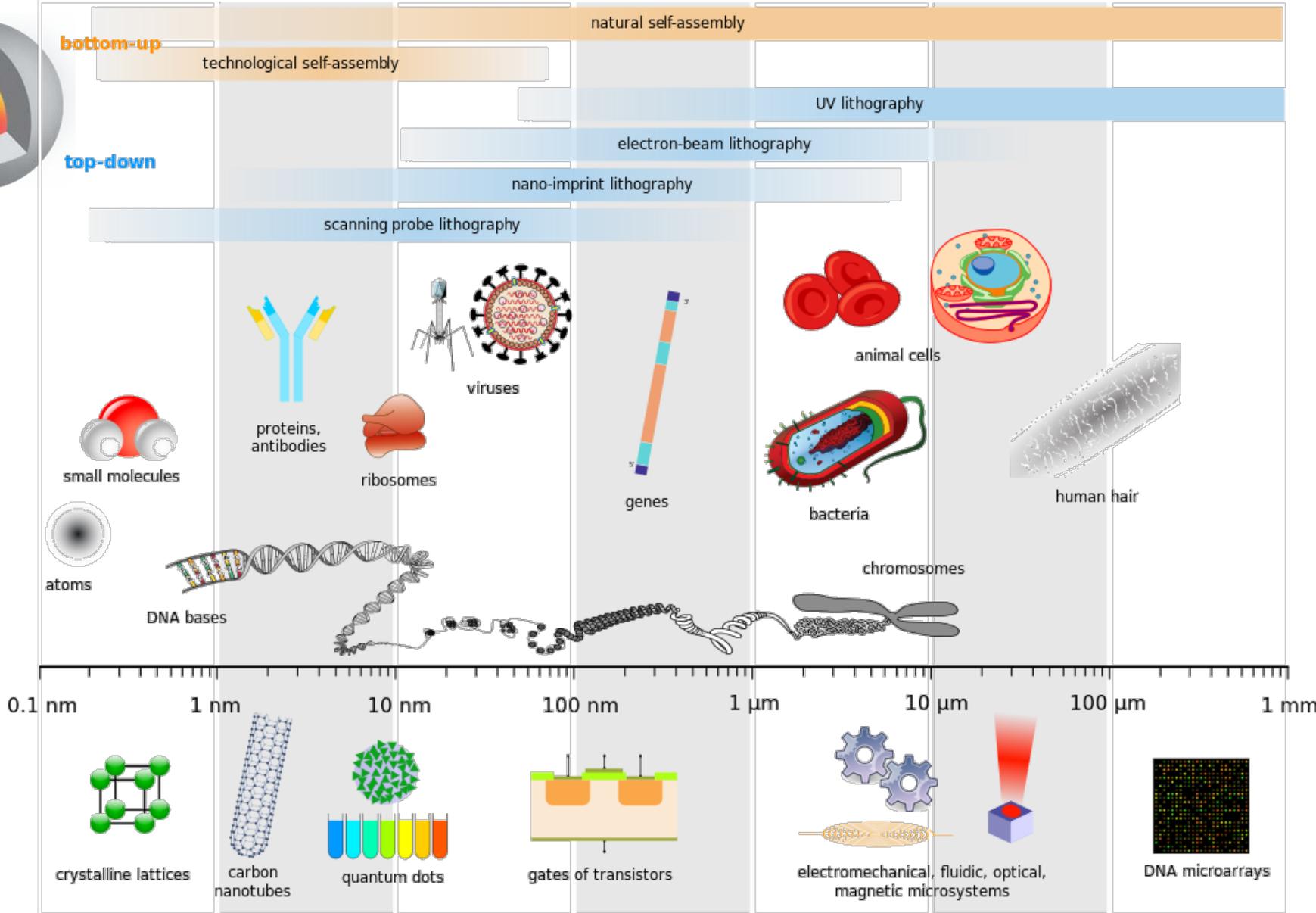
- El ser humano desde tiempos inmemorables ha demostrado una gran habilidad para modificar la naturaleza a gran escala:
  - El hombre abandona su vida nómada para pasar a cultivar campos y criar animales, edifica casas y edificios, desvía ríos, construye canales y diques,... → modifica la naturaleza y su entorno en función de sus necesidades.
  - Levanta grandes construcciones:
    - Algunas perduran con la historia: pirámides de Egipto y del México prehispánico, la gran muralla china, el Empire State Building en Nueva York,...
    - Otras sucumbieron al paso de los años: el coloso de Rodas, la biblioteca de Alejandría,...
- Paralelamente ha demostrado un gran interés en dominar la materia desde lo más pequeño

## » ¿Qué es la nanotecnología?

**NANO** proviene de la palabra latina “*nanus*” = enano

**1 nm = una milmillonésima parte de un metro =  $10^{-9}$  m**

# LAS NANOESTRUCTURAS, LA NANOCIENCIA Y LA NANOTECNOLOGÍA



El objeto más pequeño que podría llegarse a apreciar a simple vista ronda los 10000 nm

[Comparación de escalas de tamaño](#)

Imagen de Guillaume Paumier (Wikimedia con licencia CC BY-SA 2.5)



# LAS NANOESTRUCTURAS, LA NANOCIENCIA Y LA NANOTECNOLOGÍA

Años 40	<ul style="list-style-type: none"><li>• Von Neuman estudia la posibilidad de crear sistemas que se auto-reproducen como una forma de reducir costes.</li></ul>
1959	<ul style="list-style-type: none"><li>• Richard Feynmann habla por primera vez en una conferencia sobre el futuro de la investigación científica.</li></ul>
1966	<ul style="list-style-type: none"><li>• Se realiza la película "Viaje alucinante" que cuenta la travesía de unos científicos a través del cuerpo humano.</li></ul>
1974	<ul style="list-style-type: none"><li>• N. Taniguchi emplea por primera vez el término nanotecnología</li></ul>
1985	<ul style="list-style-type: none"><li>• Curl, Kroto y Smalley descubren los buckminsterfullerenes (<math>C_{60}</math>)</li></ul>
1989	<ul style="list-style-type: none"><li>• Se realiza la película "Cariño he encogido a los niños".</li><li>• Eigler y Schweizer manipulan átomos en un microscopio de efecto túnel</li></ul>
1996	<ul style="list-style-type: none"><li>• Sir Harry Kroto gana el Premio Nobel por haber descubierto fullerenes</li></ul>
1997	<ul style="list-style-type: none"><li>• Se fabrica la guitarra más pequeña el mundo.</li></ul>
1998	<ul style="list-style-type: none"><li>• Se logra convertir a un nanotubo de carbono en un nanolápiz que se puede utilizar para escribir</li></ul>
2001	<ul style="list-style-type: none"><li>• J. Gimzewski inventa la calculadora más pequeña del mundo.</li></ul>
2004	<ul style="list-style-type: none"><li>• Plan Nacional I+D+i con una A. E. dedicada a Nanociencia y Nanotecnología</li><li>• Se aislan planos individuales de grafeno</li></ul>
2007	<ul style="list-style-type: none"><li>• OCDE grupo trabajo sobre el desarrollo responsable de la nanotecnología</li></ul>
2008	<ul style="list-style-type: none"><li>• ISO con normas relacionadas con la nanotecnología</li></ul>



# LAS NANOESTRUCTURAS, LA NANOCIENCIA Y LA NANOTECNOLOGÍA

- **¿Nanociencia o nanotecnología?**

- Tecnología → permite el aprovechamiento práctico de conocimientos científicos.
- Hasta el momento se ha desarrollado de forma impetuosa → *nanociencia*
- Nanotecnología → engloba aspectos básicos y aplicados
  - “Investigación científica y desarrollo tecnológico que permiten entender, a nivel atómico y molecular, todos los fenómenos que ocurren en la nanoescala, con el fin de utilizar este conocimiento para crear estructuras, materiales, dispositivos y sistemas de complejidad creciente que posean nuevas propiedades y realicen nuevas funciones debido al pequeño tamaño de sus componentes”

- **Una cuestión de tamaño**

Efectos clásicos

- más pequeño = más reactivo
- más pequeño = más rápido
- más pequeño = más capacidad

Efectos cuánticos

- Cambios en niveles de energía
- Distintas prop. qcas. y fcas.
- Sintonizar propiedades



# LAS NANOESTRUCTURAS, LA NANOCIENCIA Y LA NANOTECNOLOGÍA

## Efectos clásicos

- **Relación superficie/volumen:** A medida que disminuye el tamaño de un objeto, aumenta la proporción de átomos que se ubican en su superficie, lo que les confiere un diferente entorno que a los átomos internos, dando lugar a diferentes propiedades.
- **más pequeño = más reactivo:** Va a costar menos mover un átomo que se encuentra en la superficie
- **más pequeño = más rápido:** En los dispositivos electrónicos los electrones viajan de un lugar a otro y su velocidad depende del tipo de material. El tamaño se reduce y el recorrido del electrón también.
- **más pequeño = más capacidad:** En el almacenamiento de datos se busca disminuir el tamaño de bits.



# LAS NANOESTRUCTURAS, LA NANOCIENCIA Y LA NANOTECNOLOGÍA

## Efectos cuánticos

- Pueden producir cambios en las **estructuras electrónicas**.
- Los cambios en **niveles de energía** son muy sensibles al cambio en el tamaño.
- Distintas **propiedades química y físicas**.
- **Sintonizar propiedades** → en función del tamaño las propiedades serán diferentes, por lo que controlando el tamaño, se controlarán las propiedades.

**INCONVENIENTE!!**  
Dificultad para obtener objetos/materiales totalmente idénticos.



# LAS NANOESTRUCTURAS, LA NANOCIENCIA Y LA NANOTECNOLOGÍA

- La **nanociencia** es el estudio de los procesos fundamentales que ocurren en las estructuras de un tamaño entre 1 y 100 nm, las cuales se conocen como **nanoestructuras**.
- La **nanotecnología** es el área de investigación que estudia, diseña y fabrica materiales o sistemas a escalas nanoscópicas y les da alguna aplicación práctica.
  - Industria de semiconductores → reducir tamaño de sus dispositivos → ver, medir, modificar y manipular átomos y moléculas en una escala del orden de los nanómetros.

## ¿QUÉ TIENE DE ESPECIAL ESTE TAMAÑO?



### Oro Macroscópico

Massy Biagio - Flickr con licencia CC

- Distancia entre átomos de Au de aprox. 0,3 nm.
- Los materiales de tamaño macro/microscópico presentan iguales propiedades físicas y químicas independientemente del tamaño.

### Nanopartículas de Oro

Wikimedia Commons con licencia CC



- El fragmento nanoscópico de Au ya no es dorado. De hecho, su color cambia en función del tamaño.
- También pueden cambiar otras propiedades como el punto de fusión.



# LAS NANOESTRUCTURAS, LA NANOCIENCIA Y LA NANOTECNOLOGÍA

- La fabricación y el uso de las nanopartículas no es algo nuevo de nuestro tiempo, sino que los nanomateriales han sido empleados por el ser humano desde hace siglos:



- Los artesanos de la Edad Media ya mezclaban pequeñas cantidades de oro o plata con el vidrio a fin de obtener diferentes colores en el vidrio. De esta forma eran capaces de fabricar imponentes vidrieras de vivos colores para las iglesias.

[Vidriera de la Sainte-Chapelle](#)

Fotografía de Miguel Hermoso Cuesta (Wikimedia Commons con licencia CC BY-SA 4.0)

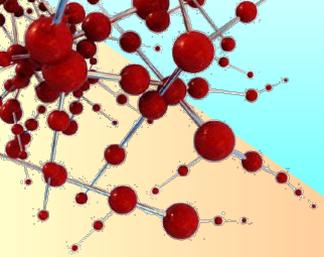


[Mural en Bonampak](#) (Chiapas, México)

Fotografía de Elelicht (Wikimedia Commons con licencia CC BY-SA 3.0)

- Los mayas empleaban tinturas con una tonalidad de azul especial que ha resultado ser muy resistente al paso del tiempo. Esto es debido a que mezclaban el colorante indigo con unas arcillas que presentaban cavidades de tamaño nanoscópico.

# LAS NANOESTRUCTURAS, LA NANOCIENCIA Y LA NANOTECNOLOGÍA



Producción y almacenamiento de hidrógeno

Células solares

Componentes de baterías

Catalizadores

Tratamiento de aguas

Monitorización de contaminantes

Lab-on-a-chip

Textiles Autolimpiables

Fibras híbridas

Textiles técnicos

Textiles médicos

Liberación de medicamentos

Escáner

Terapia del cáncer

Agentes de contraste

Biomarcadores

Antibacterianos

Antioxidantes

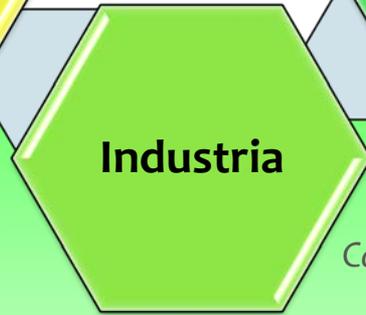
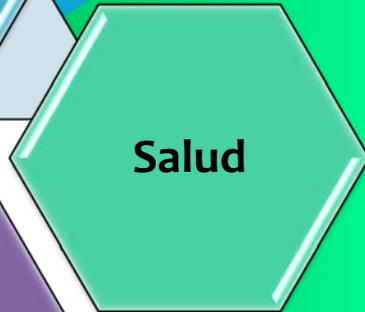
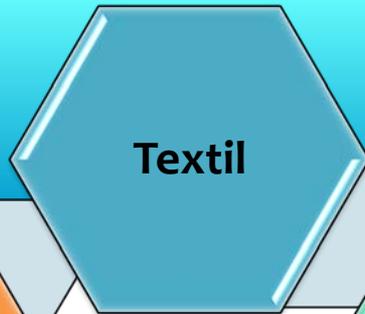
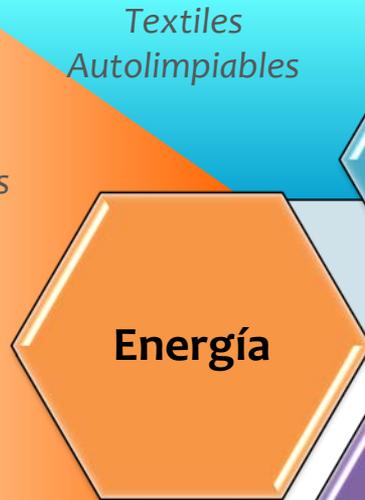
Fungicidas

Procesado de alimentos

Embalaje

Nutracéuticos

Nanocomposites funcionales



Dibujo de circuitos electrónicos

Computadoras cuánticas

Almacenamiento de datos

Catálisis

Bloqueadores UV

Plásticos reforzados

Nanopigmentos

Efecto barrera



# LA FÍSICA CUÁNTICA: ¿ONDAS O PARTÍCULAS?

## La física clásica

- S XVII, Isaac Newton ➔ el movimiento de todos los objetos del universo era gobernado por reglas muy simples (las 3 leyes de Newton)
  - 1ª ley, ley de la inercia: un objeto en reposo permanecerá en reposo a menos que se le aplique una fuerza. Un objeto en movimiento con velocidad constante continuará en movimiento a menos que se le aplique una fuerza externa.
  - 2ª ley: la aceleración de un objeto es directamente proporcional a la fuerza que actúa sobre él e inversamente proporcional a la masa.
  - 3ª ley: si dos cuerpos interactúan, la fuerza ejercida sobre el primer cuerpo por el segundo es igual y opuesta a la fuerza ejercida sobre el segundo cuerpo por el primero.
  - Ley de la gravitación universal: existe una fuerza de atracción entre dos objetos cualesquiera y cuya magnitud corresponde al resultado de dividir el producto de sus masas entre el cuadrado de la distancia que los separa.

*“El futuro está determinado por el presente”*

Partícula = posición + velocidad  $\Rightarrow$  energía, momento, ...

Objetos grandes (planetas, balón, ...)  $\Rightarrow$  cuerpos clásicos



# LA FÍSICA CUÁNTICA: ¿ONDAS O PARTÍCULAS?

## La física clásica

*“El futuro está determinado por el presente”*

Partícula = posición + velocidad  $\Rightarrow$  energía, momento, ...

Objetos grandes (planetas, balón, ...)  $\Rightarrow$  cuerpos clásicos

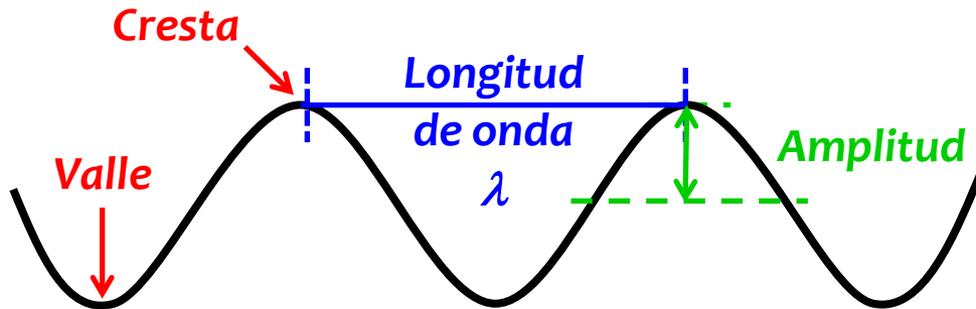
- Las leyes que rigen la nanoescala son diferentes a las que conocemos, a aquellas que obedecen los objetos macroscópicos.
- Según la física clásica, si se conocen las fuerzas que actúan sobre un cuerpo, se puede estudiar su movimiento.
  - Es decir, conociendo el presente de forma exacta, es posible calcular el futuro antes de que ocurra.
  - Gracias a esta teoría fue posible que el hombre llegara a la Luna (1969) o incluso a Plutón (2006).
    - » Es posible predecir trayectorias



# LA FÍSICA CUÁNTICA: ¿ONDAS O PARTÍCULAS?

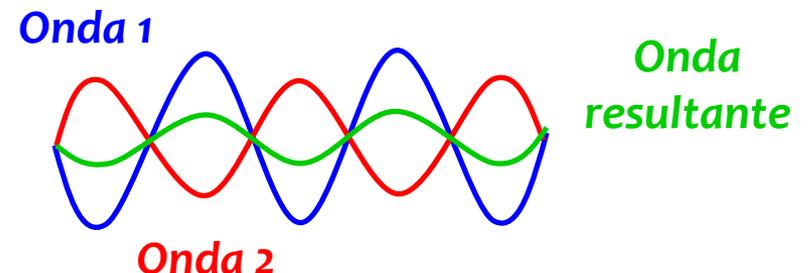
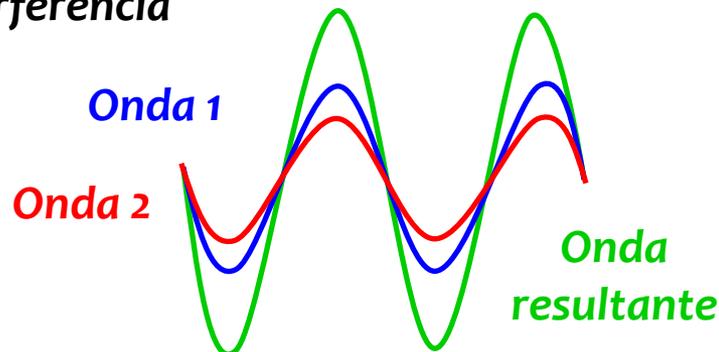
## La luz, ¿partículas u ondas?

- Newton  $\Rightarrow$  comportamiento de la luz como partículas (luz viaja en línea recta, rebota en espejos, ...) – como una pelota contra la pared
- Otros científicos  $\Rightarrow$  comportamiento de la luz como onda (vibración que se propaga en el espacio) – como las ondas del agua o el sonido a través del aire



Frecuencia ( $\nu$ ): nº de crestas que pasan por un lugar concreto en un segundo

- Mientras que un objeto no puede compartir con otro el espacio que ocupa, puede existir más de una onda en un mismo lugar y al mismo tiempo  $\Rightarrow$  **patrón de interferencia**



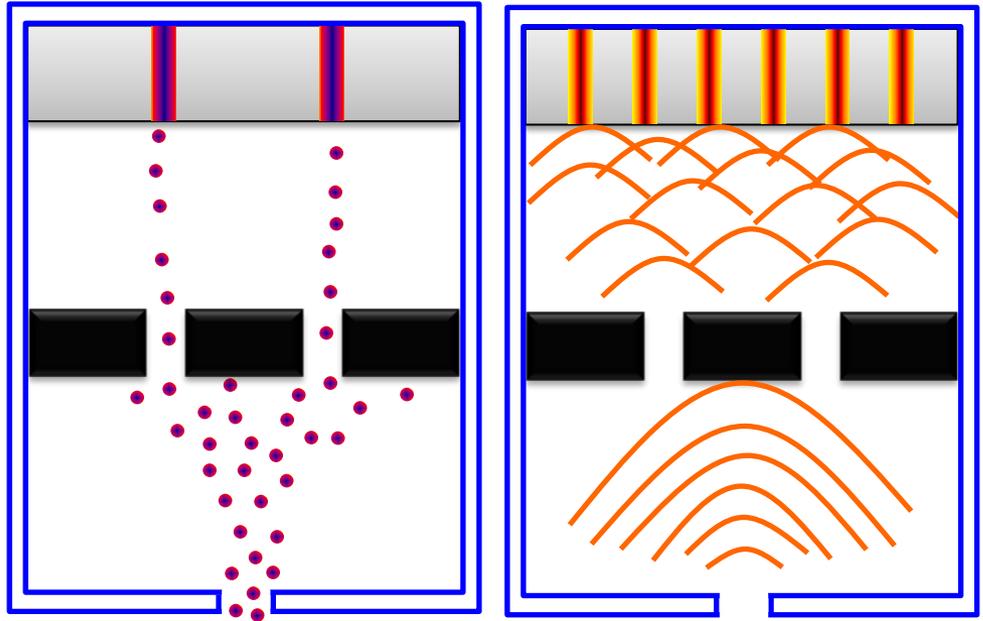


# LA FÍSICA CUÁNTICA: ¿ONDAS O PARTÍCULAS?

## La luz, ¿partículas u ondas?

- Thomas Young (1810) ⇒ gracias a su experimento de la doble rendija probó la naturaleza ondulatoria de la luz

Comprobó cómo la luz procedente de una fuente lejana al difractarse por el paso entre dos rendijas daba lugar a un patrón de interferencias.



*Experimento de la doble rendija con partículas (izda.) y mostrando el diagrama interferencial de la luz (dcha.)*

- **¿Qué está vibrando?** ⇨ James Clerk Maxwell ⇒ leyes de la electricidad y el magnetismo (ecuaciones de Maxwell)
  - La electricidad y el magnetismo son manifestaciones de un mismo fenómeno físico: el electromagnetismo
  - La luz es una onda electromagnética que viaja en el espacio: lo que vibra son los campos eléctricos y magnéticos



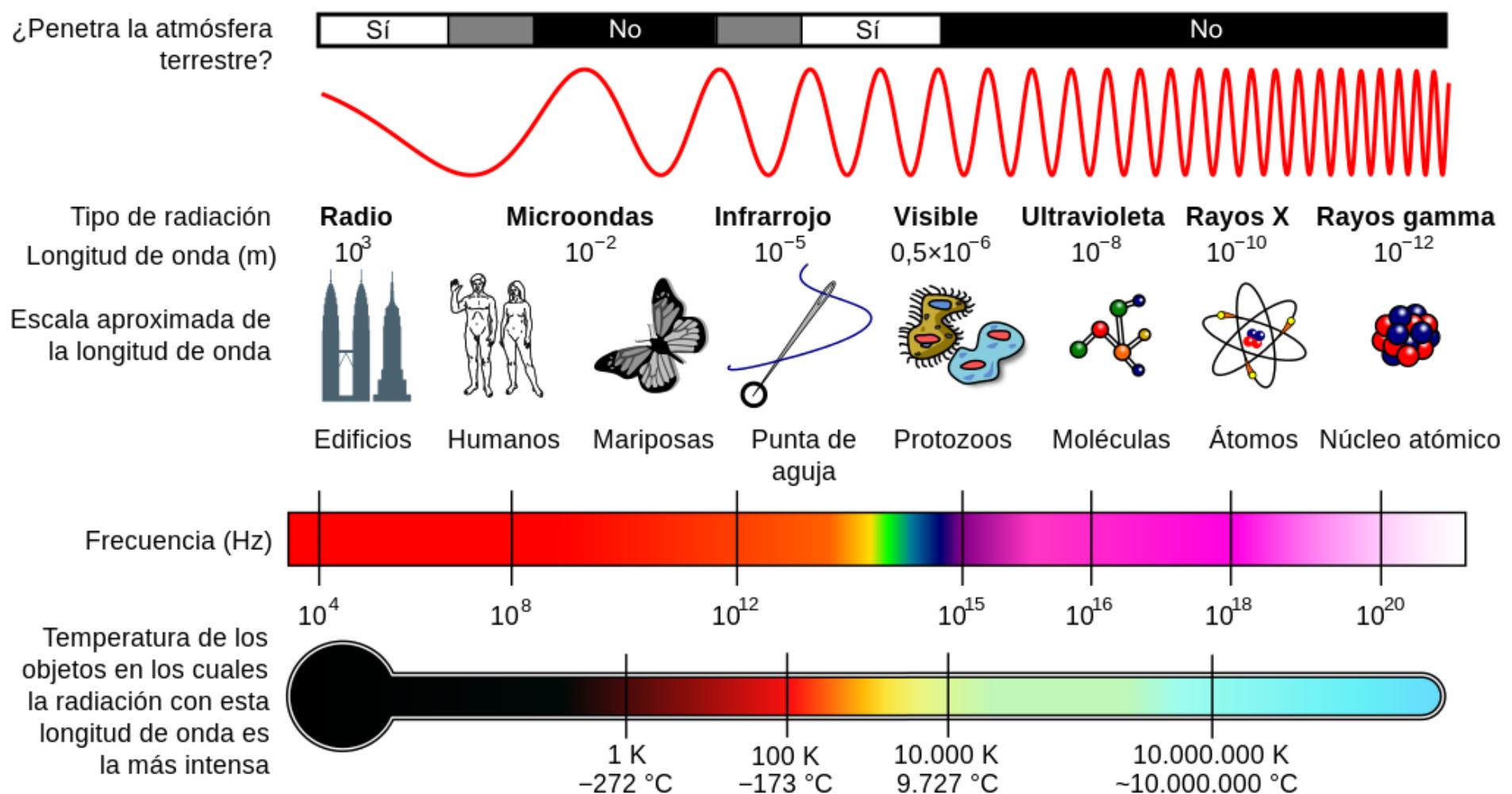
# LA FÍSICA CUÁNTICA: ¿ONDAS O PARTÍCULAS?

## La luz, ¿partículas u ondas?

[Espectro electromagnético](#)

Imagen de Crates – versión original en inglés de inductiveload (Wikimedia Commons con licencia dominio público)

- Longitud de onda: determina el color





# LA FÍSICA CUÁNTICA: ¿ONDAS O PARTÍCULAS?

## La luz, ¿partículas u ondas?

- La física clásica establece una separación clara entre:
  - Partículas  $\Rightarrow$  son objetos como una pelota que tiene una masa y de rige por las leyes de Newton
  - Ondas  $\Rightarrow$  como el sonido, la luz o las olas, que son fenómenos que se propagan, difractan y son capaces de crear patrones de interferencias
- Paralelamente se conoce el espectro electromagnético, donde en función de la frecuencia de la radiación, ésta tendrá una energía diferente.
  - Cuanto mayor sea la frecuencia (o menor la longitud de onda), mayor energía tendrá la radiación y será más penetrante.

$$v = \frac{1}{\lambda}$$

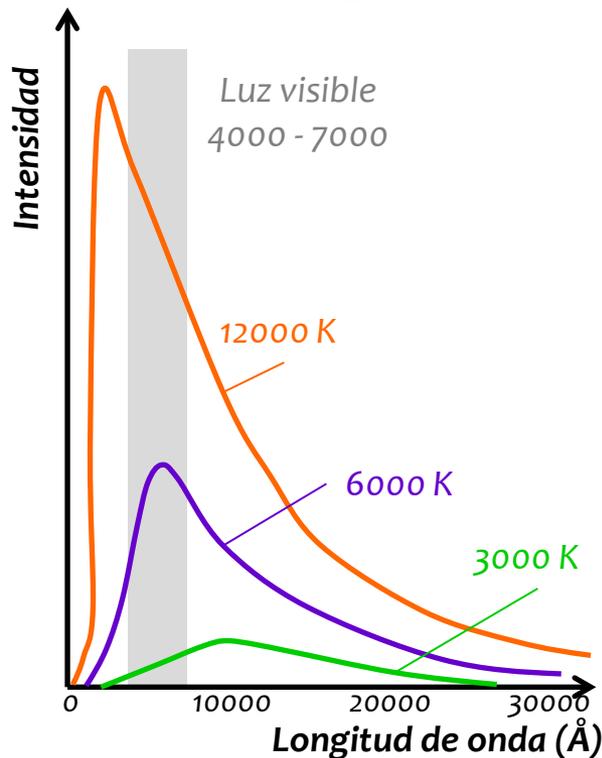
- Finales S. XIX y principios del S. XX  $\Rightarrow$  interacción de la radiación electromagnética con la materia no podía ser explicada por las leyes del electromagnetismo (Maxwell).
- Nuevas tecnologías  $\Rightarrow$  explorar la estructura atómica de la materia
- J.J. Thomson (1887)  $\Rightarrow$  electrón y otras partículas subatómicas



# LA FÍSICA CUÁNTICA: ¿ONDAS O PARTÍCULAS?

## La radiación del cuerpo negro

- Este fue el primer fenómeno que no fue posible explicar mediante las teorías de la física clásica
- **Cuerpo negro (CN):** un objeto que absorbe toda la luz que le llega, motivo por el cual se ve negro.
- Los cuerpos irradian energía en forma de calor.
- Cuanto más caliente esté el objeto, la longitud de onda a la cual irradia la mayor parte de su energía se hace más corta.



- Al calentar un objeto, como por ejemplo un trozo de hierro, a bajas temperaturas la energía que se irradia presenta longitudes de onda muy elevadas dentro de la región del infrarrojo, por lo que no son visibles. A medida que aumenta la temperatura, la longitud de onda de la radiación va disminuyendo hasta la región del visible.
- La E emitida por un CN presenta un pico a  $\lambda$  intermedias y era muy pequeña a altas y bajas  $\lambda$ .
  - Según teoría clásica  $\rightarrow E \propto \nu^2 \Rightarrow E$  total radiada por un CN debía ser infinita (*catástrofe del ultravioleta*)
- Max Planck (1900)  $\Rightarrow$  los átomos radiaban energía en cantidades fijas (**cuantos**).  $E = h \nu$  ( $h = 6.6261 \cdot 10^{-34}$  Js)

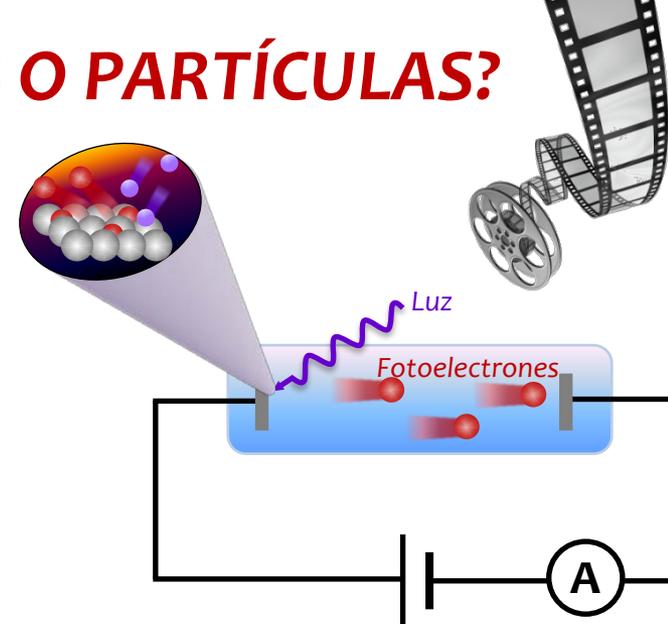
Representación del espectro de radiación del cuerpo negro



# LA FÍSICA CUÁNTICA: ¿ONDAS O PARTÍCULAS?

## El efecto fotoeléctrico

- Al iluminar una superficie metálica se observa que algunos electrones pueden escapar, gracias a que la energía de la luz es transferida a ellos.
- ¿Una luz más intensa qué efecto tendrá?
  - Teoría clásica  $\Rightarrow$  los  $e^-$  saldrían con más energía
  - Realidad  $\Rightarrow$  aumenta el n° de electrones que se desprenden del metal, pero con la misma energía.
- La energía de los electrones depende de la frecuencia
  - La luz roja de baja frecuencia, no importa lo brillante que sea, raras veces consigue extraer electrones, mientras que la luz azul de alta frecuencia y la ultravioleta casi siempre lo logran.
- Albert Einstein (1905)  $\Rightarrow$  la única manera de explicar el efecto fotoeléctrico era considerando a la luz como un haz de pequeñas partículas (**fotones**) los cuales llevaban pequeños paquetes de energía.
  - La energía de cada fotón depende de su frecuencia
    - Luz más intensa  $\Rightarrow$  más fotones, igual energía
    - Mayor frecuencia  $\Rightarrow$  mayor E de los electrones que se desprenden



Dibujó esquemático del efecto fotoeléctrico



# LA FÍSICA CUÁNTICA: ¿ONDAS O PARTÍCULAS?

## Ondas de materia

- Si la luz tiene propiedades de onda y partícula a la vez, ¿por qué una partícula (con masa) no puede tener también propiedades de onda?
  - Louis De Broglie (1924)  $\Rightarrow$  toda partícula tiene asociada una onda
    - Las partículas deberían producir patrones de interferencia o de difracción
    - A velocidad normal: objeto con masa muy grande  $\Rightarrow \lambda$  muy pequeñas  $\Rightarrow$  no se nota la interferencia o la difracción
  - Clinton Davisson y Lester Germer (1928)  $\Rightarrow$  demostraron la naturaleza ondulatoria del electrón

- Hicieron incidir un haz de electrones sobre una superficie de níquel y hallaron un patrón de difracción  $\Rightarrow$  se confirma el comportamiento ondulatorio de los electrones.

» Dualidad onda-corpúsculo

[Patrón de difracción de electrones del compuesto inorgánico Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>](#)

Imagen de Sven.hovmoeller (Wikimedia Commons con licencia CC BY-SA 3.0)



# LA FÍSICA CUÁNTICA: ¿ONDAS O PARTÍCULAS?

## El principio de incertidumbre

- Es una consecuencia de la dualidad onda-corpúsculo.
- Heisenberg (1927)  $\Rightarrow$  ciertos pares de magnitudes físicas, como la posición y el momento ( $p = m v$ ) de una partícula, no pueden medirse simultáneamente con precisión.
  - Las mediciones fluctuarán  $\Rightarrow$  incertidumbre en la determinación de la posición y el momento (o velocidad)
  - El producto de las incertidumbres es del orden de la constante de Planck ( $h = 6.6261 \cdot 10^{-34}$  Js)
- No se puede realizar una medición sin alterar el sistema
- La física cuántica sólo nos permite conocer una distribución de la probabilidad de las medidas  $\Rightarrow$  probabilidad de que un evento suceda
- Erwin Schrödinger (1925)  $\Rightarrow$  cómo se comportan las ondas de materia bajo la influencia de las fuerzas externas

$$\hat{H}|\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \frac{\hat{p}^2}{2m}|\Psi(t)\rangle + V(\hat{r}, t)|\Psi(t)\rangle$$



# TEORÍA ATÓMICA

## Las primeras ideas sobre los átomos

- Demócrito (460 a.C.) ➔ la materia formada por partículas muy pequeñas que no podían subdividirse (**átomos** que en griego significa indivisible)
  - Esta teoría no fue apoyada por otros pensadores como Aristóteles.
- Aristóteles (380 a.C.) ➔ la materia es continua y formada por combinaciones de 4 elementos: tierra, aire, fuego y agua.
  - Debido a la gran influencia de Aristóteles en la sociedad, sus teorías perduraron 2000 años
- John Dalton (principios del S. XIX) ➔ revivió la teoría atómica
  - Todos los elementos están constituidos por partículas muy pequeñas llamadas átomos.
    - Elemento puro: formado por átomos de la misma clase y con la misma masa
    - Un elemento se diferencia de los otros porque está formado de átomos distintos, los cuales tienen masas distintas
    - Compuestos: formados por combinaciones de átomos de diversas clases
    - Reacciones químicas: ocurren cuando hay cambios en las combinaciones de átomos de un compuesto



# TEORÍA ATÓMICA: Orígenes

## Leyes fundamentales de las reacciones químicas

- Ley de conservación de la masa (o de Lavoiser)

*La materia ni se crea ni se destruye, solo se transforma*

- Por ejemplo, si se hacen reaccionar 2 g de hidrógeno con 16 g de oxígeno, se obtendrán 18 g de agua.

- Ley de las propiedades definidas (o de la composición constante o ley de Proust)

*Cuando dos o más elementos se combinan para formar un compuesto determinado, lo hacen siempre en una relación ponderal constante, independientemente del proceso seguido para formar dicho compuesto.*

- Por ejemplo, en el agua por cada gramo de hidrógeno hay 8 gramos de oxígeno (proporción 1/8), cualquiera que sea la procedencia del agua.



# TEORÍA ATÓMICA: Orígenes

- Ley de las proporciones múltiples (o de Dalton)

*Cuando dos elementos se combinan entre sí para formar más de un compuesto, los pesos del elemento que se combina con un peso fijo del otro están en la relación de números enteros pequeños.*

- Por ejemplo, 32 g de azufre se combinan con 48 g de oxígeno y daban un compuesto, pero también podían combinarse con 32 g de oxígeno y entonces se producía un compuesto diferente. La relación entre los pesos de oxígeno en estos dos compuestos es de 3 a 2.

- Ley de los volúmenes de combinación (o de Gay-Lussac)

*La relación de volúmenes de los gases que reaccionan es de números enteros pequeños, y que los volúmenes gaseosos resultantes de la reacción guardan una relación sencilla y constante con cada uno de los reaccionantes gaseosos (todos los volúmenes tienen que estar medidos a la misma P y T).*



# TEORÍA ATÓMICA: Orígenes

- Ley de los volúmenes de combinación (o de Gay-Lussac)

*La relación de volúmenes de los gases que reaccionan es de números enteros pequeños, y que los volúmenes gaseosos resultantes de la reacción guardan una relación sencilla y constante con cada uno de los reaccionantes gaseosos (todos los volúmenes tienen que estar medidos a la misma P y T).*

- Por ejemplo, 2 litros de hidrógeno (gas) reaccionan con 1 litro de oxígeno (gas) para dar 2 litros de agua (gas): entonces ocurre que volumen de agua/volumen de hidrógeno = 1/1 y volumen de agua/volumen de oxígeno = 2/1; y que volumen de hidrógeno/volumen de oxígeno = 2/1.



# TEORÍA ATÓMICA

- La teoría atómica actual se debe a Dalton que se publica en 1808.
- Partiendo de la idea de Demócrito de que la materia es discontinua, establece una serie de postulados:
  - a) Los elementos están formados por átomos, pequeñas partículas indivisibles que no pueden crearse ni destruirse.
  - b) Todos los átomos de un mismo elemento son exactamente iguales en su masa y en todas sus propiedades.
  - c) Los átomos de elementos diferentes tienen masa y propiedades distintas.
  - d) Dos o más átomos de distintos elementos pueden combinarse entre sí en una relación numérica sencilla y formar un compuesto, dando lugar a los “átomos” de ese compuesto, que serán iguales entre sí.
- **Hipótesis de Avogadro**
  - El físico italiano Avogadro, admite los postulados de la teoría atómica de Dalton, pero no sus ideas en cuanto a la composición de la moléculas.
  - Supone que las reacciones ocurren entre números enteros de moléculas, con lo cual la relación entre las moléculas de los reactivos y de los productos son números enteros sencillos



# TEORÍA ATÓMICA

- Como ésta también era la relación entre los volúmenes de los gases en las reacciones gaseosas (experimento de Gay-Lussac), Avogadro, en 1811, establece la siguiente hipótesis o principio:

**Volúmenes iguales de gases, en idénticas condiciones de presión y temperatura, contienen igual número de moléculas.**

- Avogadro es a quién se debe el concepto claro de lo que es una molécula, lo cual supone un avance trascendental para el desarrollo de la Química.
- Esta hipótesis de Avogadro fue confirmada posteriormente de forma experimental, mediante la determinación correcta de las masas moleculares de sustancias gaseosas, con lo cual se convirtió en una ley, la ley de Avogadro.



# TEORÍA ATÓMICA

- Es importante tener en cuenta los siguientes aspectos del lenguaje químico a fin de que se pueda comprender todo lo tratado y lo que se tratará a continuación:
  - **Sustancia:** es la clase de materia que posee composición definida e invariable y unas propiedades específicas con las que puede ser identificada (ej.: oxígeno, agua, plata, sulfuro de carbono...)
  - **Elemento:** sustancia formada por un solo tipo de átomos y que no puede descomponerse en otras sustancias más simples (ej.: oxígeno, plata, azufre...)
  - **Compuesto:** sustancia formada por átomos de dos o más elementos distintos unidos químicamente en proporciones definidas y que, por tanto, pueden descomponerse en otras sustancias más simples (ej.: agua, sulfuro de carbono, óxido de plata...)



# ESTRUCTURA ATÓMICA

- **El átomo aislado: estructura atómica**

- Hemos llegado a la conclusión de que la materia está constituida por unas partículas pequeñísimas, los átomos, que son indestructibles y que cada clase de los mismos posee una masa y unas características determinadas.
- Pero,
  - » ¿cómo son esos átomos por dentro?, o de otra manera
  - » ¿cuál es su estructura?
- Estas preguntas, se plantearon los científicos del siglo XIX, una vez que la teoría atómica fue aceptada por la comunidad científica de aquellos tiempos.



# **ESTRUCTURA ATÓMICA**

## ***Partículas fundamentales: electrón, protón y neutrón***

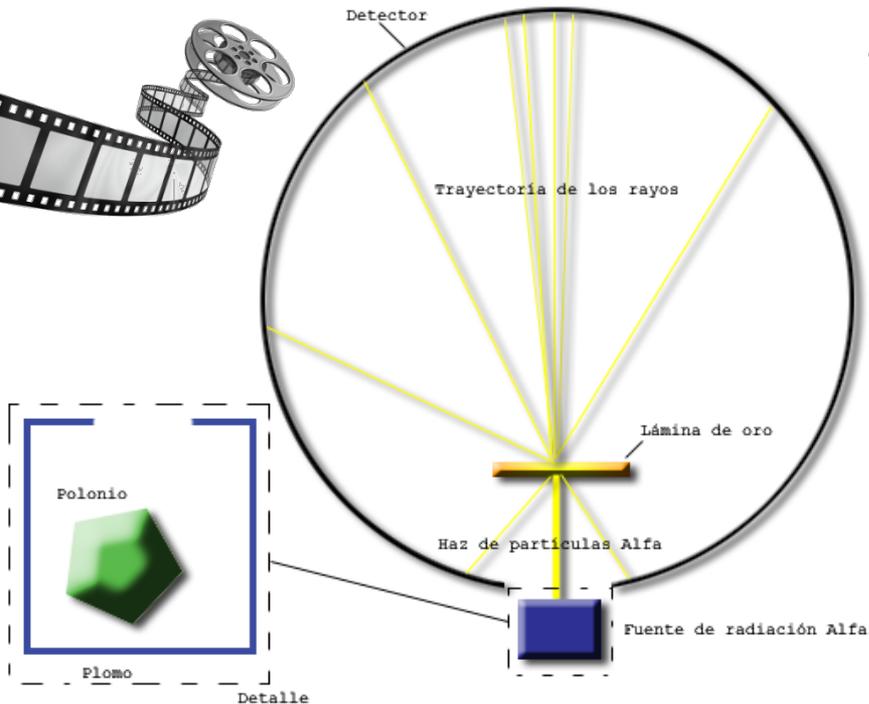
- El siguiente paso en el conocimiento de la materia fue el descubrimiento de una naturaleza eléctrica.
- Volta con la construcción de la pila eléctrica y sobre todo Faraday con sus experimentos electrolíticos (hacia 1833) dieron los primeros indicios de mayor trascendencia.
- Después, a través de experimentos realizados sobre descargas eléctricas en gases, se puso en evidencia la existencia de partículas subatómicas, las llamadas partículas fundamentales, de naturaleza eléctrica y que eran iguales en todos los átomos.
- El átomo no era, pues, indivisible, aunque en las reacciones químicas se conserve como tal (prescindiendo de la formación de iones), con excepción de las reacciones nucleares.



# ESTRUCTURA ATÓMICA

## Partículas fundamentales: electrón, protón y neutrón

- J.J. Thomson (1887) ➔ descubre la existencia de unas partículas muy pequeñas, ligeras y con carga eléctrica negativa → **electrones**
  - Masa = 1/2000 la masa del H
  - **El átomo no era la partícula más pequeña de la materia**
  - Átomo neutro ⇨ Los átomos debían tener partículas cargadas positivamente para contrarrestar la carga de los electrones.



- Ernest Rutherford (1909) ➔ hizo pasar un haz de partículas con carga positiva a través de una lámina de oro muy delgada
  - La mayoría de las partículas no se desvían de su trayectoria ⇨ regiones de la lámina de oro en las que no había nada
  - Pequeña cantidad de partículas desviadas ⇨ repelidas por centros muy densos con carga positiva (**núcleo atómico**)

### Experimento de Rutherford

Imagen de Dr Juzam (Wikimedia Commons con licencia dominio público)



## **ESTRUCTURA ATÓMICA**

### **Partículas fundamentales: electrón, protón y neutrón**

- Al chocar con el vidrio situado detrás del ánodo, hacían que aquel se iluminase.
- Se dio cuenta además de que estaban constituidos por partículas con carga negativa y, trabajando con distintos gases y con cátodos de metales diferentes, comprobó que siempre la relación  $e/m$  (siendo  $e$  la carga eléctrica de cada una de esas partículas y  $m$  su masa), era siempre la misma en todos los metales y gases estudiados.
- Descubrió así, en 1897, la existencia de una partícula de carga negativa cuya presencia en toda la materia, es decir, en todos los átomos era constante. Se trataba del electrón y Thomson no pudo determinar ni su carga ni su masa.
- Posteriormente se determinó que su carga es de  $1,6 \times 10^{-19}$  culombios y su masa de  $9,11 \times 10^{-28}$  g.



# ESTRUCTURA ATÓMICA

## Partículas fundamentales: electrón, protón y neutrón

### Protón

- El físico alemán Goldstein continuó con los experimentos en tubos de descarga, pero introduciendo una innovación: el cátodo que utilizaba estaba perforado con unos agujeros o canales.
- En 1886 descubrió un nuevo tipo de radiaciones, traspasando esos canales del cátodo, se situaban en el extremo del tubo detrás de aquél.
- Se denominaron rayos canales o rayos positivos, puesto que se comprobó que se trataba de partículas con carga eléctrica positiva. Además observó,
  - que el color de la luz que emitían, variaba con el gas del tubo (fundamento de los anuncios luminosos)
  - que la relación  $e/m$  de esas partículas variaba con el gas del tubo



# ESTRUCTURA ATÓMICA

## Partículas fundamentales: electrón, protón y neutrón

- Estos resultados se interpretaron suponiendo que
  - » se trataba de iones positivos
  - » cuando el gas era hidrógeno, la partícula positiva era la de menor masa de todos los gases estudiados ( $1,672 \times 10^{-24}$  g), 1840 veces mayor que la del electrón, y de igual carga y signo contrario.
  - » a esa partícula se le denominó protón.
  - » se llegó al conocimiento de que en un mismo elemento existían átomos que diferían solo en la masa (isótopos).

### • Neutrón

- En 1932, lo descubrió el físico inglés Chadwick, realizando experiencias radiactivas.
- No tiene carga eléctrica y su masa es muy próxima a la del protón ( $1,64 \times 10^{-24}$  g).



# ESTRUCTURA ATÓMICA

- Por otra parte, intuyó que en el núcleo habría otras partículas que serían neutras y de masa muy parecida a la del protón.
- Con relación al átomo neutro, hay que tener en cuenta los siguientes conceptos, términos y simbología:

**NÚCLEO ATÓMICO:** protones + neutrones

**Z:** número atómico = número de protones = número de electrones

**N:** número de neutrones

**A:** número másico;  $A = Z + N$ , nº de protones + nº de neutrones

Y cuando se desea indicar **A** y **Z** en un átomo X, se representa éste como  ${}^A_ZX$

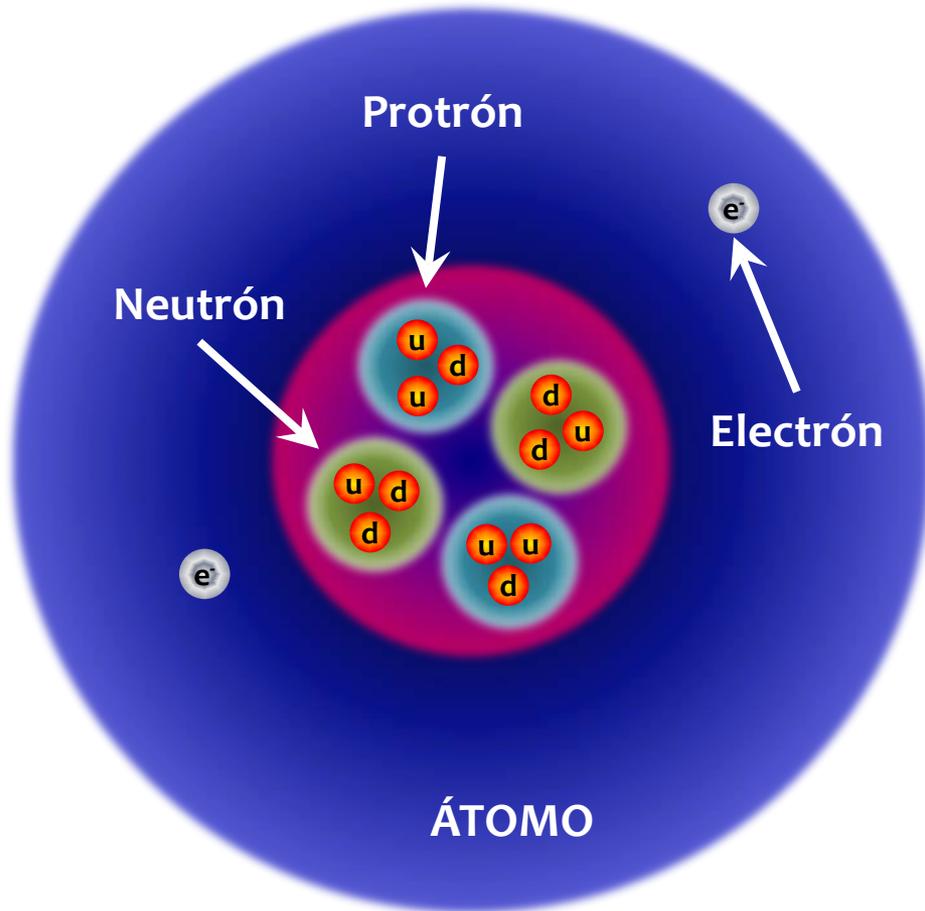
**MASA ATÓMICA:** es la masa de un átomo, definida en unidades de masa atómica (*uma*).

**Uma:** masa igual a 1/12 de la masa de un átomo del isótopo de carbono  ${}^{12}\text{C}$ .



# ESTRUCTURA ATÓMICA

- A través de todos estos estudios se estableció la estructura atómica que conocemos hoy en día:



*Dibujo esquemático de la estructura de un átomo*

Elemento	Tamaño (m)
Átomo	$\sim 10^{-10}$
Núcleo	$\sim 10^{-14}$
Protón y neutrón	$\sim 10^{-15}$
Electrón	$< 10^{-18}$
Quark	$< 10^{-19}$

- Quark: fermiones elementales masivos que interactúan fuertemente formando la materia nuclear.
  - Neutrón  $\rightarrow$  dos quark abajo (d) y un quark arriba (u)
  - Protón  $\rightarrow$  un quark abajo (d) y dos quark arriba (u)



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Los espectros atómicos

- Espectros atómicos

- Llegados a este punto hay que tener en cuenta que:

- **Frecuencia,  $\nu$** : Número de ondas que pasan por un punto determinado en un segundo. Se mide en hercios, Hz (ciclos/segundo).
- **Longitud de onda,  $\lambda$** : Distancia entre dos puntos idénticos en ondas consecutivas. Se mide en unidades de longitud: metros, centímetros, nanómetros ( $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$ )
  - Pero, ¿a qué se debía la aparición de estas rayas y su frecuencia característica? Esto es lo que trató de explicar el científico danés Bohr con su modelo atómico.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Los espectros atómicos

### LOS ESPECTROS DE EMISIÓN

#### Espectro continuo



#### Líneas de emisión



#### Líneas de absorción



- La radiación emitida por un gas a través del cual se ha hecho pasar una descarga eléctrica **no es continua** sino que se aprecian varias líneas separadas unas de otras.
  - » En función de la composición cada átomo tiene un espectro.

*Representación del espectro continuo y de las líneas de emisión y absorción atómicas*

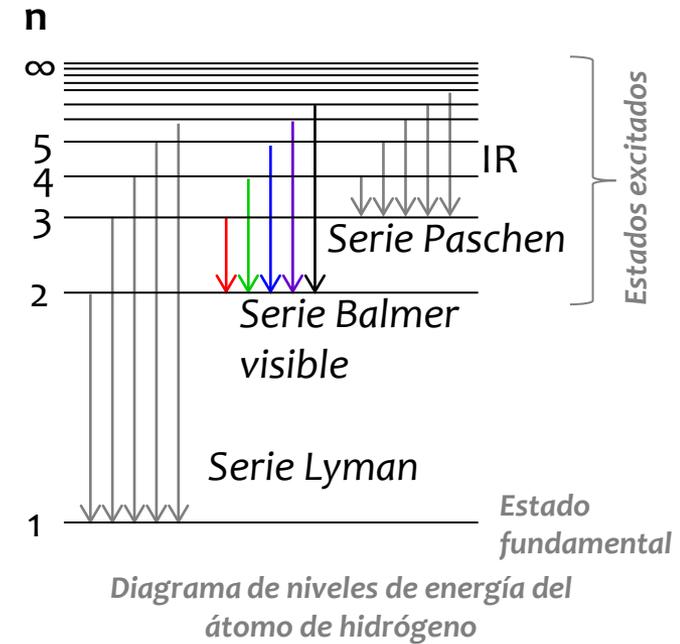
- Niels Bohr ➡ las líneas discretas de los espectros atómicos tiene algo que ver con la idea de Planck de los *cuantos* de energía.
  - Un electrón en un átomo se mueve en una órbita circular alrededor del núcleo debido a la atracción eléctrica
  - El electrón sólo puede moverse en ciertas órbitas que cumplan con la condición cuántica de que la circunferencia de la órbita sea igual a un múltiplo entero de la longitud de onda del electrón
  - Cuando esté en una de esas órbitas, el electrón no irradia energía, sólo lo hace al cambiar de órbita ( $E = h \times \text{frecuencia}$ ) ➔ **Niveles de energía**



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Los espectros atómicos

- El electrón cambia de órbita (de nivel) al ser irradiado y absorber energía ( $E = h \nu$ ).
- Las órbitas donde la probabilidad de encontrar el electrón es máxima, se encuentran cuantizadas  
➔ cuantización de la energía ➔ **niveles de energía**
- Los saltos de los electrones entre niveles de energía es una situación similar a la de un balón que cae por unas escaleras. El balón sólo puede estar en los peldaños y es imposible encontrarlo en las situaciones intermedias.
  - Si se golpea el balón, se le aporta energía que puede utilizar para subir la escalera.
  - Al bajar de peldaño, estará perdiendo energía, hasta llegar al estado de mínima energía que es el más estable, el estado fundamental.





# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

- **Postulados de Bohr**

- Para tratar de explicar los espectros atómicos, en 1913 Bohr crea un nuevo modelo atómico.
- Parte de tres postulados (propuestas que él hace):
  1. El electrón solo podrá girar en ciertas orbitas circulares, de energía y radios determinados, y al moverse en ellas el electrón no radiará energía. En ellas la energía del electrón será, pues, constante (y así el sistema ya no será inestable)
  2. En esas órbitas se cumplirá que el momento angular del electrón será múltiplo entero de  $h/2\pi$ ; es decir, será  $nh/2\pi$  ( $n = 1$  para la 1ª órbita;  $n = 2$  para la 2ª, etc.), y esas serán las únicas órbitas estables.
  3. El electrón sólo emitirá cuando, estando en una de estas órbitas, pasa a otra de menor energía y absorberá energía cuando pasa a otra de mayor energía.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

- Las órbitas de Bohr son circulares, y en ellas gira el electrón (estados estacionarios) y el radio tiene un valor determinado.
- Cuando un electrón gira en la órbita que le corresponde a su estado de mínima energía, se dice que éste es el estado fundamental o normal.
- Si el electrón estando en esta órbita absorbe energía en forma de una radiación de frecuencia  $\nu$ , pasará a un estado de mayor energía, o estado excitado, saltando a una órbita más externa.
- Las frecuencias no tienen valores cualquiera, sino determinados: están cuantizadas. Cada frecuencia, pues, corresponde a una determinada cantidad de energía (y a un color).



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

- El éxito de Bohr radica en que con estos postulados y su desarrollo matemático obtuvo un valor del radio del átomo de hidrógeno coincidente con el que se había obtenido por métodos experimentales.
- Asimismo, logró explicar la causa de los espectros atómicos y con sus ecuaciones obtuvo los valores de las frecuencias de los distintos “saltos” del electrón del átomo de hidrógeno, que coincidían también con los obtenidos experimentalmente por los espectroscopistas.
- En el desarrollo matemático de Bohr tanto el radio como la energía de la órbita vienen definidos por un número  $n$  que da la condición de cuantización.
- Cuando  $n = 1$ , será la órbita de menor radio y energía, los cuales van aumentando cuando  $n$  aumenta.
- A estas energías posibles se las llama también niveles energéticos. A  $n$  se le llamó número cuántico principal.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

- **Modelo de Sommerfeld**

- En 1916 Sommerfeld considera que las órbitas podían ser elípticas y no sólo circulares.
- Introdujo así un nuevo número, el número cuántico azimutal,  $l$ , relacionado con la excentricidad de la elipse y cuyos valores dependerían de  $n$  (para cada valor de  $n$ ,  $l$  puede tomar los valores desde 0, 1, 2, 3... hasta  $n-1$ )
- Es decir, cada nivel de energía se había desdoblado en varios muy próximos, o subniveles.
- Posteriormente Zeemann introdujo el número cuántico magnético,  $m$ , que para cada valor del número cuántico azimutal,  $l$ , toma los valores  $-l, \dots, 0, \dots, +l$  (números enteros, positivos o negativos, variando de uno en uno).



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

- Por último se introdujo un cuarto número, el número cuántico de spin,  $s$ , que tiene en cuenta el giro del electrón sobre sí mismo, y que puede tomar solo dos valores,  $+1/2$  y  $-1/2$ .
- **Características de los números cuánticos**

Número cuántico	Valores permitidos	Determina para el electrón	Define para el orbital
Principal ( $n$ )	$n = 1; 2; 3; \dots \infty$	Su nivel principal de energía	Su tamaño o volumen
Secundario o azimutal ( $l$ )	$l = 0; 1; 2; \dots (n-1)$	El subnivel de energía donde se encuentra, y que está contenido en un determinado nivel de energía	La forma geométrica espacial
Magnético ( $m_l$ )	$m_l = +l; \dots 0; \dots -l$	El orbital al cual pertenece y que es parte de un subnivel de energía	La orientación espacial que adopta bajo la influencia de un campo magnético externo intenso
Spin ( $m_s$ )	$m_s = +1/2; -1/2$	Su sentido de rotación alrededor de su eje imaginario	-



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

- **Modelo mecanocuántico**

- Se admite la dualidad de la luz, (dos naturalezas complementarias), como onda y como partícula.
- El físico francés de Broglie, en 1924, propuso también el carácter dual de los electrones.
- Como consecuencia de ese carácter dual es imposible localizar al electrón con exactitud.
- Heisengerg formula lo que se conoce como principio de incertidumbre (o indeterminación) de Heisenberg:
  - No se puede conocer simultáneamente la posición exacta del electrón y el valor exacto de su momento (o de su velocidad).
  - Hay que utilizar la idea de probabilidad (o densidad electrónica) de encontrarlo en una determinada zona del espacio alrededor del núcleo.



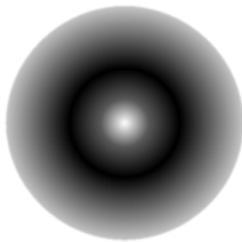
# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

- En 1926 el físico austriaco Schrödinger formuló una ecuación que describía el comportamiento y la energía del electrón en términos de una función de onda,  $\Psi$  (psi), función de las coordenadas  $x$ ,  $y$ ,  $z$ .
- Se encontró que las soluciones de la ecuación están caracterizadas por tres parámetros, que coinciden con los números cuánticos  $n$ ,  $l$  y  $m$ .
- **Significado de orbital**
  - Cada solución concreta para unos valores concretos de  $n$ ,  $m$  y  $l$ , da la expresión de una función de onda determinada,  $\Psi$ .
  - Esta función de onda  $\Psi$  que describe el estado de un solo electrón y que informa de la energía asociada al mismo, es lo que se denomina orbital.

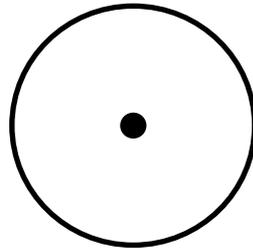


# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

- Estas funciones de onda  $\Psi$  no tienen un significado físico, pero sí su cuadrado,  $\Psi^2$ , ya que está directamente relacionado con la probabilidad de encontrar al electrón en cierta región del espacio.



(a)



(b)

Representación de:

(a) la nube de carga

(b) la superficie de probabilidad

- A esta imagen se la denomina densidad de probabilidad, densidad electrónica o nube de carga.
- El concepto de orbital es, diferente del concepto de órbita de Bohr, que implica la localización del electrón, mientras que ahora lleva implícito el sentido de deslocalización del electrón o probabilidad de encontrarlo en un punto.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

- **Números cuánticos: valor y significado**

- Los distintos orbitales, se nombran con el valor de  $n$  (1, 2, 3...) y la letra correspondiente al valor de  $l$  ( $l = 0$ , orbitales  $s$ ;  $l = 1$ , orbitales  $p$ ;  $n = 2$ , orbitales  $d$ ;  $n = 3$ , orbitales  $f$ ...).
- Al conjunto de todos los orbitales del mismo número principal se le conoce como piso o capa ( $n = 1$ , capa  $K$ ;  $n = 2$ ,  $L$ ;  $n = 3$ ,  $M$ ;..)
- **Tipo de orbital según los valores de  $n$ ,  $l$ ,  $m$**

$n$	$l$	Orbital	$m_l$	Funciones de onda posibles
1	0	1s	0	1
2	0	2s	0	1
2	1	2p	-1, 0, +1	3
3	0	3s	0	1
3	1	3p	-1, 0, +1	3
3	2	3d	-2, -1, 0, +1, +2	5
4	0	4s	0	1
4	1	4p	-1, 0, +1	3
4	2	4d	-2, -1, 0, +1, +2	5
4	3	4f	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	7

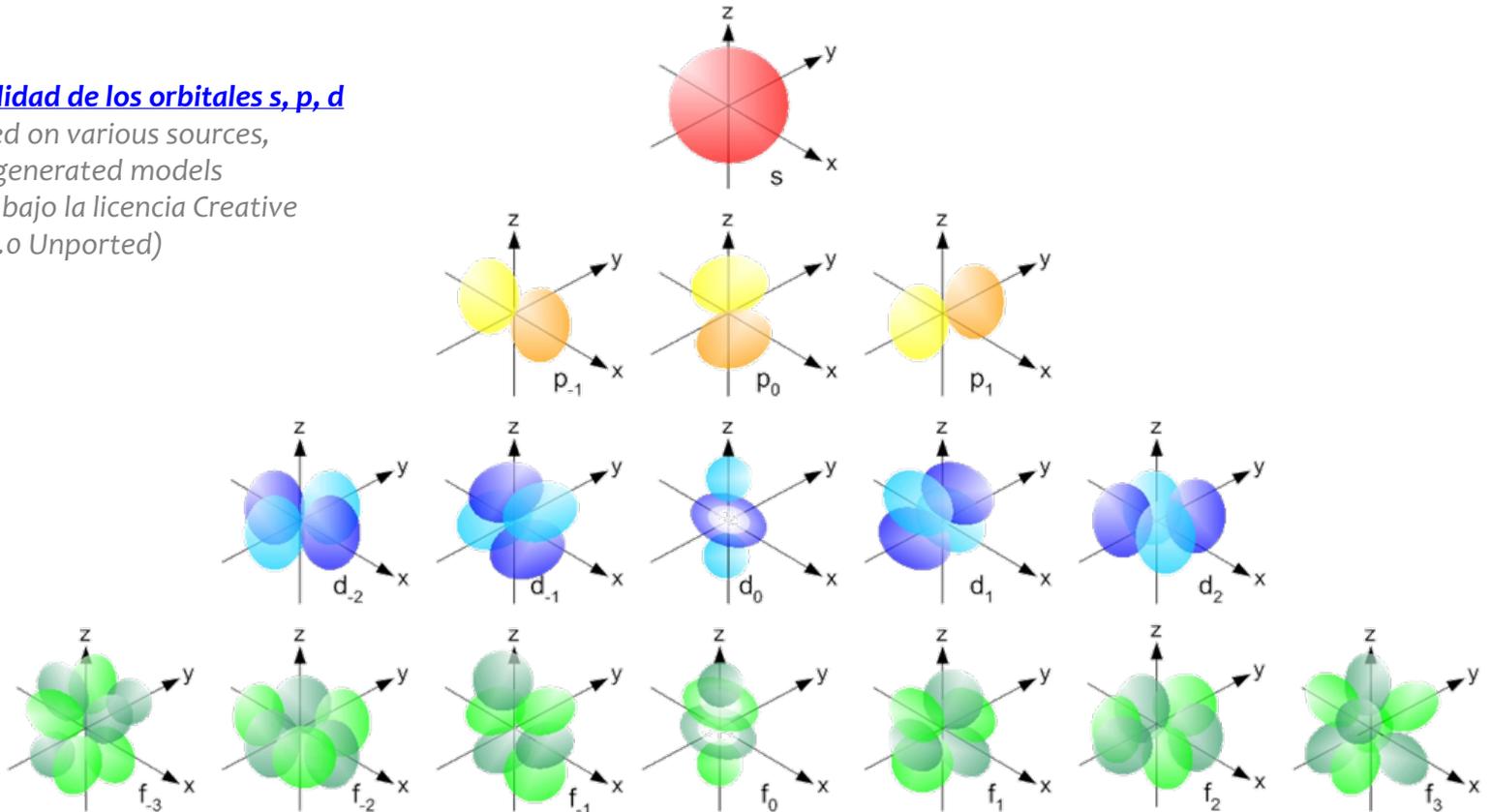


# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

- El valor de  $n$  está asociado con el “tamaño” y el valor de  $l$  con la “forma espacial”.
- Así para  $l = 0$ , la forma espacial es esférica, y para  $l = 1$ , es una forma lobular. Son respectivamente, los orbitales  $s$  y los  $p$ . en este último caso, habrá tres orbitales que difieren en su orientación en el espacio, orbitales  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$ .

## Superficies de probabilidad de los orbitales $s$ , $p$ , $d$

Imagen por haade based on various sources,  
sketch NOT computer generated models  
(Wikimedia Commons bajo la licencia Creative  
Commons Atribución 3.0 Unported)





# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Los enlaces y las moléculas

- ¿POR QUÉ LOS ÁTOMOS QUIEREN ESTAR JUNTOS?
  - Llenar todas sus capas  $\Rightarrow$  configuración de gas noble

### Tabla periódica de los elementos

grupo 1																	18	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Fl	Uup	Lv	Uus	Uuo

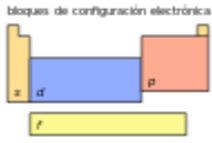
**Fe**  
 Hierro  
 [Ar] 3d<sup>6</sup> 4s<sup>2</sup>

masa atómica o número másico del isótopo más estable: 55.845  
 energía de ionización (eV): 762.5  
 electronegatividad: 1.83

simbolo químico: Fe  
 nombre: Hierro  
 configuración electrónica: [Ar] 3d<sup>6</sup> 4s<sup>2</sup>

estados de oxidación más comunes están en negrita: +2, +3

- metales alcalinos
- alcalinotérreos
- otros metales
- metales de transición
- lantánidos
- actínidos
- metaloideos
- no metales
- halógenos
- gases nobles
- elementos desconocidos
- masas de elementos radiactivos entre paréntesis



notas  
 + por ahora, los elementos 113, 115, 117 y 118 no tienen nombre oficial designado por la IUPAC.  
 + 1kg/mol = 96485 eV  
 + todos los elementos tienen un estado de oxidación implícito cero.

138.9054	140.116	140.9076	144.242	(145)	150.36	151.964	157.25	158.9253	162.500	164.9303	167.259	168.9342	173.054
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Lantano	Cerio	Praseodimio	Niobio	Prometio	Samario	Europio	Gadolinio	Terbio	Disprosio	Holmio	Erbio	Terencio	Ytterbio
(227)	232.0376	231.0368	238.0289	(237)	(244)	(243)	(247)	(247)	(251)	(252)	(257)	(261)	(269)
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No
Actinio	Torio	Protactinio	Uranio	Neptunio	Plutonio	Americio	Curcio	Berkelio	Californio	Einsteinio	Fermio	Mendelevio	Nobelio

### Tabla Periódica

Imagen de 2012rc, Edit (Translation to Spanish) by The Photographer  
 (Wikipedia bajo la licencia Creative Commons Atribución 3.0 Unported)



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

- **Ubicación de los electrones en el átomo: configuración electrónica**
  - Se considera que los orbitales de los átomos polielectrónicos son análogos, aunque no idénticos, a los del hidrógeno.
  - Para determinar la configuración electrónica de un átomo en su estado fundamental se aplica lo que se conoce como proceso de construcción, que a su vez se basa en las siguientes normas.
    - **Principio de energía mínima**
      - En un átomo los electrones se colocan en los orbitales disponibles de menor energía.
      - Orbital con menor valor para  $n + l$  que otro, supone que el orbital tiene menor energía y un orbital con menor valor de  $n$  que otro, supone que el orbital tiene menor energía.
      - Se ha determinado el siguiente orden de energía de los orbitales :

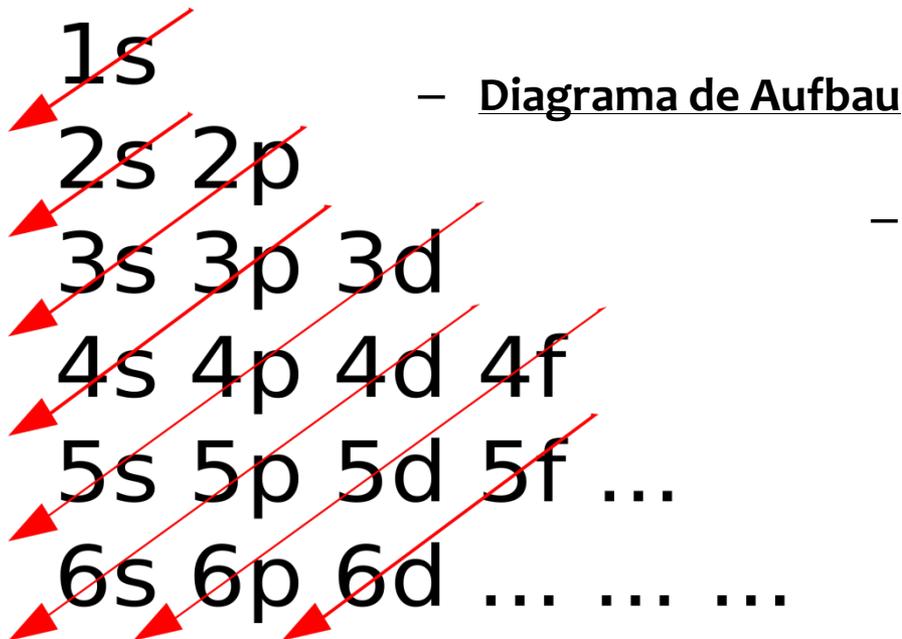




# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## – Principio de exclusión de Pauli

- En un mismo átomo no puede haber nunca dos electrones con los 4 números atómicos iguales. El número  $s$  toma los valores  $(+\frac{1}{2}$  y  $-\frac{1}{2})$ . Se dice que tienen spines opuestos o antiparalelos. y se representa cada uno por una flecha  $\uparrow$  o  $\downarrow$ .



## – Regla de Hund

- Cuando una serie de orbitales (p,d ó f) se están completando, los electrones se distribuyen en ellos manteniéndose con spines paralelos, mientras sea posible.

### Orden de llenado de las subcapas electrónicas

Imagen de Bono~commons wiki (Wikimedia Commons bajo la licencia Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 Unported)



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

- Configuración electrónica de los elementos y su situación en el sistema periódico

– Las configuraciones electrónicas se representan así:

La del **hidrógeno** ( $Z = 1$ ) será  $1s^1$

La del **helio** ( $Z = 2$ ),  $1s^2$

} primer periodo

empieza con el **litio** ( $Z = 3$ ),  $1s^2 2s^1$  y

termina con el **neón** ( $Z = 10$ ),  $1s^2 2s^2 2p^6$

} segundo periodo

– Abreviadamente la configuración electrónica puede escribirse indicando solo los electrones de la última capa, mientras que los de las internas que estén llenas se representan por las letras correspondientes, K, L, M,..o bien con el símbolo del gas noble precedente.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

empieza con el **sodio** ( $Z = 11$ ), que será  $(K,L) 3s^1$  ó  $[\text{Ne}] 3s^1$   
y termina en el **argón** ( $Z = 18$ ),  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$  } tercer periodo

- En el cuarto periodo existen 10 elementos más que en los anteriores:
  - al llegar al escandio ( $Z = 21$ ) el electrón siguiente no se sitúa en el orbital 4p, sino en el disponible de menor energía, 3d, el escandio,  $[\text{Ar}] 4s^2 3d^1$
  - Empieza así un conjunto de 10 elementos ,10 electrones más, que se van introduciendo en los 5 orbitales 3d.
  - Cuando estos orbitales d ya se han llenado en el cinc, el siguiente electrón se sitúa en un orbital 4p, galio,  $[\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p^1$ , hasta llegar al kriptón.
- En el quinto periodo ocurre algo análogo.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

- En el Sistema Periódico se distinguen los siguientes tipos de elementos
- **Elementos de los grupos principales (s, p)**
  - Son los grupos 1, 2 (ns) y 13 al 18 (np)
  - Son los grupos de los “metales alcalinos”, “metales alcalinotérreos”, grupo del boro, del nitrógeno, del oxígeno (o anfígenos), halógenos y gases nobles.
  - Se están llenando los orbitales ns y np.
- **Elementos de transición (d)**
  - Son los grupos del 3 al 12 (series de 10 elementos), en los periodos 4, 5 y 6
  - Se están llenando los orbitales d de la penúltima capa (n-1)d
- **Elementos de transición interna (f)**
  - Dos series de 14 elementos, situada cada serie en los periodos 6 y 7
  - Se están llenando los orbitales f de la antepenúltima capa (n-2)f



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## *Tipos de enlaces*

- Con excepción de los gases nobles, los átomos en la naturaleza no están aislados, sino unidos a otros átomos mediante enlaces químicos, dando lugar a combinaciones químicas.
- Los átomos forman enlaces perdiendo, ganado o compartiendo los electrones necesarios para alcanzar las configuraciones electrónicas externas de los gases nobles, las más estables (regla del octete)
- **Tipos de enlaces**
  - Al producirse ese reajuste mutuo, los electrones dejan de estar sometidos a la influencia exclusiva del átomo al que pertenecían y caen también bajo la influencia (total o parcial) del otro átomo del enlace.

**Enlace iónico**

**Enlace covalente**

**Enlace metálico**

**Fuerzas intermoleculares o de van der Waals**

**Enlace de hidrógeno**

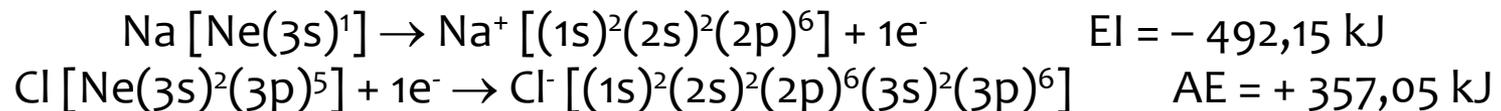
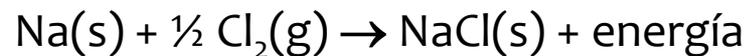


# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- Enlace iónico

- El enlace iónico está formado por elementos de una electronegatividad muy diferente, es decir, por un metal y un no metal.
- Se origina por la atracción electrostática entre iones de carga opuesta, y estos iones se forman, a su vez, al producirse una transferencia completa de electrones entre los átomos de enlace.
- Cuando se pone en contacto el sodio con el cloro, tiene lugar una reacción química en la que se forma cloruro sódico y se desprende energía:





# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- El balance de energía no es favorable, hay que considerar otros dos nuevos factores:
  - a) Que al **aproximarse los iones de carga** opuesta hasta la distancia con que formarían la “*molécula*”  $\text{Na}^+\text{Cl}^-$  se desprendería una energía debido a la atracción electrostática entre ambas cargas.
  - b) En la **formación del cristal iónico** hay un desprendimiento de energía mucho mayor, porque en el retículo cristalino que se origina, **un ión determinado está próximo a varios iones de carga opuesta**, y no a uno sólo.
  - Los compuestos iónicos son sólidos cristalinos y no se puede hablar de moléculas.
  - En el proceso de formación de los sólidos iónicos hay que tener en cuenta la energía implicada al disponerse los iones en los nudos de la red, se denomina energía reticular o de red.
  - El valor de esta energía se determina por procedimientos experimentales o por métodos indirectos o ciclo de Born-Haber.
  - A igual carga de los iones, en iones isoelectrónicos (igual número de electrones), el tamaño de los aniones es superior al de los cationes.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- **Enlace covalente**

- Hay muchos casos en los que los valores de la EI y de AE no son favorables a la formación de un enlace iónico.
- El enlace entre dos átomos que comparten dos e- se llama enlace covalente simple.
- Par enlazante se denomina al par de e- de un enlace covalente (-) y par solitario al par de e- que no intervienen en el enlace.



- Enlaces covalentes múltiples: cuando dos átomos comparten 4e- se forma un enlace covalente doble y si comparten 6e-, se forma un enlace covalente triple.





# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- Enlace covalente - Orden de enlace, longitud de enlace y polaridad del enlace
  - El término orden de enlace (OE) describe si un enlace covalente es:
    - Simple (OE =  $2e^-/2 = 1$ )
    - Doble (OE =  $4e^-/2 = 2$ )
    - Triple (OE =  $6e^-/2 = 3$ )
  - La longitud de enlace es la distancia entre los centros de los 2 átomos unidos por un enlace covalente. Un doble enlace es más corto que uno simple y el triple es más corto todavía.
  - Un enlace en que los dos átomos no comparten por igual los  $e^-$ , se llama enlace covalente polar:







# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## *Tipos de enlaces*

- **Enlace covalente – El modelo de Lewis**

– Algunas ideas básicas en la teoría de Lewis son:

1. Los e-, especialmente los que están en la capa más externa o de valencia, juegan un papel fundamental en el enlace químico.
2. En algunos casos se transfieren e- de un átomo a otro, formándose iones positivos y negativos que se atraen entre sí mediante fuerzas electrostáticas denominadas enlaces iónicos.
3. En otros casos se comparten entre los átomos uno o más pares de e-; esta compartición de e- se denomina enlace covalente.
4. Los e- se transfieren o se comparten de manera que adquieren la CE de gas noble (con 8 e- más externos que forman el octeto).



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- Enlace covalente – Símbolos de Lewis y estructuras de Lewis

- Un símbolo de Lewis consiste en un símbolo químico que representa el núcleo y los e- internos de un átomo, junto con puntos situados alrededor del símbolo representando a los e- de valencia. los e- más externos.



- Una estructura de Lewis es una combinación de símbolos de Lewis que representa la transferencia o compartición de e- en un enlace químico.

enlace covalente



enlace iónico





# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- Se debe empezar con un esqueleto de la estructura correcto.
- El **esqueleto** es una disposición de átomos en el orden en que se enlazan unos con otros.
  - Ejemplo, una molécula de agua tiene un esqueleto H-O-H, y no O-H-H. En los esqueletos se distinguen: el átomo central o átomos centrales (unidos a 2 o más átomos) y los átomos terminales (unidos solamente a otro átomo).
- Método específico para escribir una estructura de Lewis:
  1. Determinar el nº total de e- de valencia de la estructura.
  2. Identificar el átomo o átomos centrales (suele tratarse del átomo con EN más pequeña).
  3. Escribir el esqueleto de la estructura y unir los átomos mediante enlaces covalentes simples.
  4. Por cada enlace simple, restar 2e- del nº total de e- de valencia.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## *Tipos de enlaces*

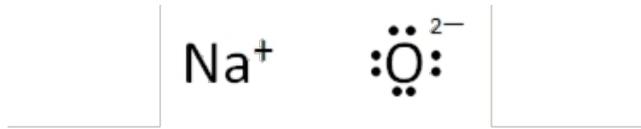
- Método específico para escribir una estructura de Lewis:
- 5. Con los e- de valencia restantes completar 1º los octetos de los átomos terminales y después completar, en la medida posible, los octetos de los átomos centrales.
- 6. Si al átomo o átomos centrales les falta e- para completar el octeto, formar enlaces covalentes múltiples transformando e- de pares solitarios de los átomos terminales en e- de pares enlazantes.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- Carga formal (CF)



– La mejor manera de establecer el esqueleto de la estructura y la estructura más verosímil es mediante el concepto de cargas formales.



- Las cargas formales son cargas aparentes que aparecen sobre algunos átomos de una estructura de Lewis cuando los átomos no han contribuido con igual nº de e- al enlace covalente que les une.
- La carga formal de un átomo en una estructura de Lewis se calcula así: **el nº de e- de valencia en el átomo neutro libre menos el nº de e- asignados a ese átomo en la estructura de Lewis.**



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- Asignamos e- a los átomos en una estructura de Lewis así:
  - Contamos todos los e- de pares solitarios como pertenecientes al átomo en que se encuentra.
  - Dividimos todos los e- de los pares enlazantes por igual entre los átomos enlazados.
- Una posibilidad para una estructura de Lewis basada en el esqueleto incorrecto NOCl es:

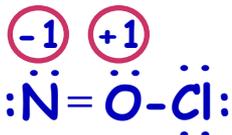


- »  $\text{N} = 5 - (4 + 2) = -1;$

- »  $\text{O} = 6 - (2 + 3) = +1;$

- »  $\text{Cl} = 7 - (6 + 1) = 0$

- Para distinguir entre CF y cargas reales, indicaremos las CF mediante números inscritos en círculos:



Estructura correcta



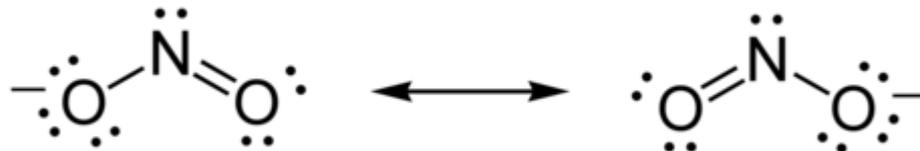
# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- Carga formal (CF)

- Como regla general, se prefiere para una molécula la estructura de Lewis en la que los átomos tienen CF cero, ( $CF = 0$ ) pero, si esto falla, debe tenerse en cuenta que:
  - De ser necesarias CF, éstas deben ser las menores posibles.
  - Las CF negativas suelen aparecer en los átomos más electronegativos y las CF positivas en los átomos menos electronegativos.
  - La suma de las CF de los átomos en una estructura de Lewis debe ser igual a cero para una molécula neutra e igual a la carga iónica para un ión poliatómico.

- Resonancia



- A veces se obtienen estructuras de Lewis que presentan problemas, por ejemplo el ozono:







# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- ¿Tiene importancia que el agua sea angular o lineal?
  - Cuando escribimos la estructura de Lewis para el agua parece que los átomos se disponen en línea recta. Sin embargo, experimentalmente se determina que la forma de la molécula no es lineal. Es angular de  $104,5^\circ$ .
  - La forma de las moléculas de agua ayuda a explicar que el agua sea un líquido y no un gas a temperatura ambiente.
  - Lo que buscamos en esta sección es un modelo sencillo que nos permita establecer aproximadamente la forma de las moléculas.
- Términos utilizados
  - Entendemos por forma molecular la figura geométrica que obtenemos cuando unimos los núcleos de los átomos enlazados mediante líneas rectas.
  - Necesitamos conocer 2 magnitudes para tener una descripción completa de la forma de una molécula:
    - las **longitudes de enlace**, son las distancias entre los núcleos de los átomos enlazados.
    - los **ángulos de enlace**, son los ángulos formados entre las líneas adyacentes que representan los enlaces.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## *Tipos de enlaces*

- Teoría de la repulsión entre pares de e<sup>-</sup> de la capa de valencia (RPECV)
  - Esta teoría se centra en los pares de e<sup>-</sup> de la capa de valencia:
    - Los pares de e<sup>-</sup> se repelen unos a otros, tanto si están en enlaces químicos (pares enlazantes) como si no están compartidos (pares solitarios).
    - Los pares de e<sup>-</sup> se disponen alrededor de un átomo con orientaciones que minimizan las repulsiones.
    - De estas orientaciones proceden las formas geométricas particulares de las moléculas.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

Nº de gr. e <sup>-</sup>	Gemetría gr. de e <sup>-</sup>	Nº de par-sol	Notación RPECV	Geometría molecular	Ángulos enl. ideal	Ejemplo
2	Lineal	0	AX <sub>2</sub>	Lineal	180°	BeCl <sub>2</sub>
3	Trigonal plana	0	AX <sub>3</sub>	Trigonal plana	120°	BF <sub>3</sub>
		1	AX <sub>2</sub> E	Angular	120°	SO <sub>2</sub>
4	Tetraédrica	0	AX <sub>4</sub>	Tetraédrica	109.5°	CH <sub>4</sub>
		1	AX <sub>3</sub> E	Pirámide trigonal	109.5°	NH <sub>3</sub>
		2	AX <sub>2</sub> E <sub>2</sub>	Angular	109.5°	OH <sub>2</sub>
5	Bipirámide trigonal	0	AX <sub>5</sub>	Bipirámide trigonal	90°, 120°	PCl <sub>5</sub>
		1	AX <sub>4</sub> E	Dientes sierra	90°, 120°	SF <sub>4</sub>
		2	AX <sub>3</sub> E <sub>2</sub>	Forma T	90°	ClF <sub>3</sub>
		3	AX <sub>2</sub> E <sub>3</sub>	Lineal	180°	XeF <sub>3</sub>
6	Octaédrica	0	AX <sub>6</sub>	Octaédrica	90°	SF <sub>6</sub>
		1	AX <sub>5</sub> E	Pirámide cuadrada	90°	BrF <sub>5</sub>
		2	AX <sub>4</sub> E <sub>2</sub>	Plano cuadrada	90°	XeF <sub>4</sub>



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- Aplicación de la teoría RPECV

- Utiliza el siguiente método de cuatro etapas para predecir la forma de las moléculas:
  1. Escribe una estructura de Lewis aceptable para la especie.
  2. Determina el nº de grupos de e- que hay alrededor de átomo central e indica si son “pares enlazantes” o “solitarios”.
  3. Deduce la geometría de grupos de e- alrededor del átomo central: lineal, trigonal-plana, tetraédrica, bipirámide-trigonal u octaédrica.
  4. Determina la geometría molecular de las posiciones alrededor del átomo central ocupadas por otros núcleos atómicos a partir de las tablas anteriores.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- Formas de las moléculas y momentos dipolares

- Hemos visto que la molécula de HCl es una molécula polar.
- Se utiliza una flecha para indicar con un comienzo cruzado (  $\text{H} \rightarrow \text{Cl}$  ) y señalando al átomo que atrae los e- con más fuerza.
- La magnitud del desplazamiento de la carga en un enlace covalente polar viene dada por el momento dipolar,  $\mu$ .
- El momento dipolar es el producto de una carga parcial ( $\delta$ ) y una distancia ( $d$ ).
$$\mu = \delta d$$
- Si el producto,  $\delta d$ , tiene un valor de  $3,34 \times 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$ , el momento dipolar,  $\mu$ , tiene un valor llamado 1 debye, D.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## *Tipos de enlaces*

- Método del enlace de valencia (EV)
  - La descripción de la formación del enlace covalente como un solapamiento de orbitales atómicos (OA) se denomina método de enlace de valencia (MEV).
  - El MEV proporciona un modelo de enlace de “e- localizados”:
    - los e- internos y los pares solitarios de e- de valencia mantienen la misma localización en orbitales que en los átomos separados, y
    - la densidad de carga de los e- de enlace está concentrada en la región de solapamiento de orbitales.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- **Hibridación de orbitales atómicos**

- En la mayor parte de los casos las descripciones de la geometría molecular no están de acuerdo con los valores observados.
- Experimentalmente se comprueba que el CH<sub>4</sub> tiene 4 enlaces C - H de igual longitud de enlace y con ángulos H - C - H de 109,5°, geometría que no podemos explicar ni con la regla del octeto de Lewis ni con el MEV operando con OA puros y sí con la teoría de RPECV.
- El problema está en que hemos descrito los “átomos enlazados” como si tuvieran el mismo tipo de orbitales (s, p,...) que los “átomos aislados no enlazados”.
- Esto se resuelve, modificando los OA de los átomos enlazados.
- Necesitamos combinar las ecuaciones de onda del orbital 2s y los 3 orbitales 2p del átomo de C para obtener un nuevo conjunto de orbitales equivalentes.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- Hibridación de orbitales atómicos

- Algunos orbitales híbridos y sus orientaciones geométricas

Orbitales híbridos	Orientación geométrica	Ejemplo
sp	lineal	BeCl <sub>2</sub>
sp <sup>2</sup>	trigonal-plana	BF <sub>3</sub>
sp <sup>3</sup>	tetraédrica	CH <sub>4</sub>
sp <sup>3</sup> d	bipirámide trigonal	PCl <sub>5</sub>
sp <sup>3</sup> d <sup>2</sup>	octaédrica	SF <sub>6</sub>



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- Método de los orbitales moleculares (OM)
  - La teoría asigna los e- de una molécula a una serie de orbitales que pertenecen a la molécula completa, que son los llamados OM.
  - Un OM solo puede contener 2 e-, y estos e- tienen los espines opuestos.
- Ideas básicas en relación con los OM
  1. El nº de OM que se forman es igual al nº de OA que se combinan.
  2. Cuando 2 OA se combinan, se forman 2 OM:
    - uno es un OM enlazante con una energía menor que los OA y
    - el otro es un OM antienlazante con una energía mayor.
  1. Los e- se colocan en los OM disponibles de energía más baja.
  2. El nº máximo de e- en un OM dado es 2 (principio de exclusión de Pauli).
  3. Los e- se colocan en los OM de idéntica energía de forma individual antes de emparejarse (regla de Hund).



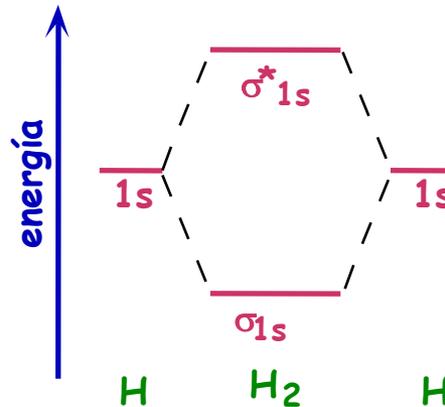
# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- Orden de enlace

$$\text{orden de enlace} = \frac{n^{\circ} e^{-} \text{ en OM enlazantes} - n^{\circ} e^{-} \text{ en OM antienlazantes}}{2}$$

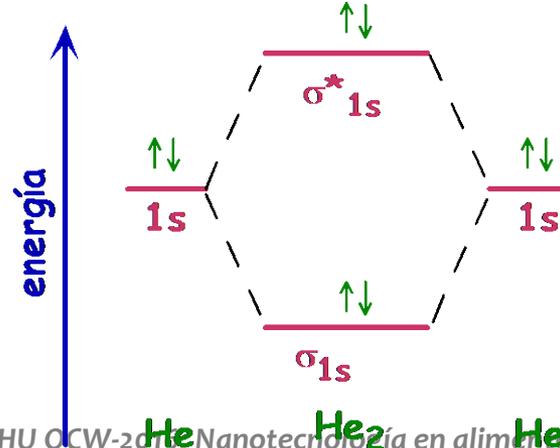
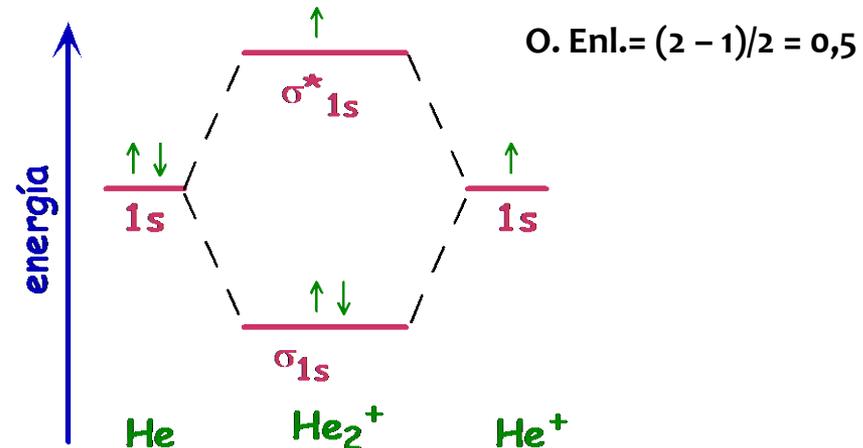
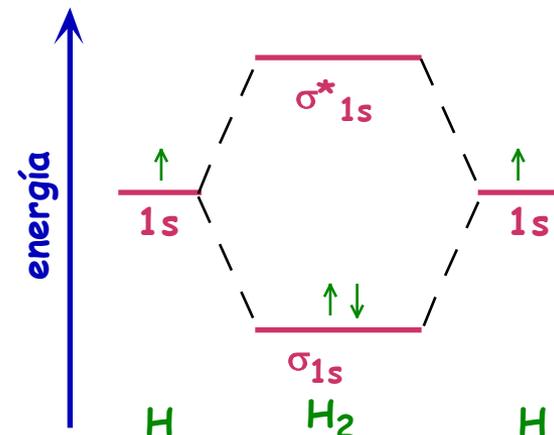
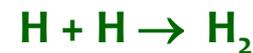
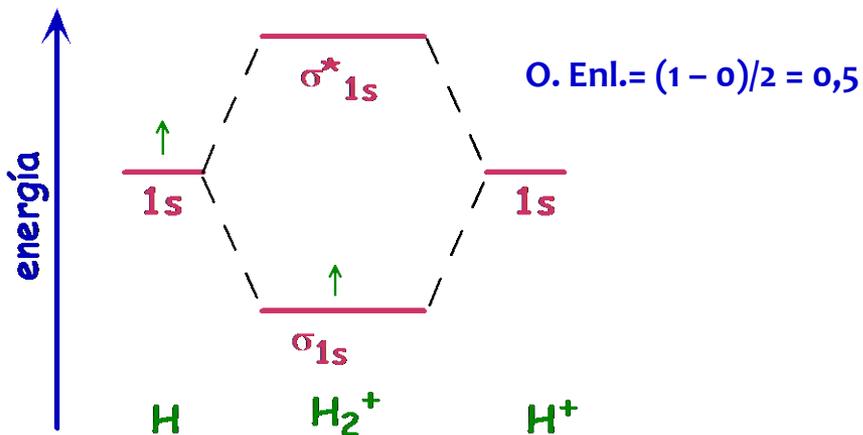
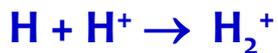
- La molécula de hidrógeno – OM de orbitales “s”





# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces





# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- **Enlace metálico**

- El átomo de Li tiene 4 orbitales de la capa de valencia ( $2s$ ,  $2p_x$ ,  $2p_y$ ,  $2p_z$ ) pero solo un  $e^-$  de valencia ( $2s^1$ ).
- Esto puede explicar la formación de la molécula gaseosa  $\text{Li}:\text{Li}$ , pero en el metal sólido cada átomo de Li está enlazado de igual manera a ocho vecinos.
- El objetivo de una teoría de enlace para los metales es:
  - explicar como puede formarse un enlace tan fuerte con tan pocos  $e^-$
  - explicar algunas propiedades que los metales muestran en mucha mayor extensión que los no metales, como la capacidad para conducir la electricidad y la capacidad de deformación.

- **El modelo del mar de electrones**

- Describe un metal sólido como una red de iones positivos inmersa en un mar de  $e^-$ .
- Por ejemplo, en el Li, los iones son  $\text{Li}^+$  y hay un  $e^-$  por átomo que contribuye al mar de  $e^-$ .
- En este mar los  $e^-$  son libres, no están unidos a ningún ión en particular, y son móviles.

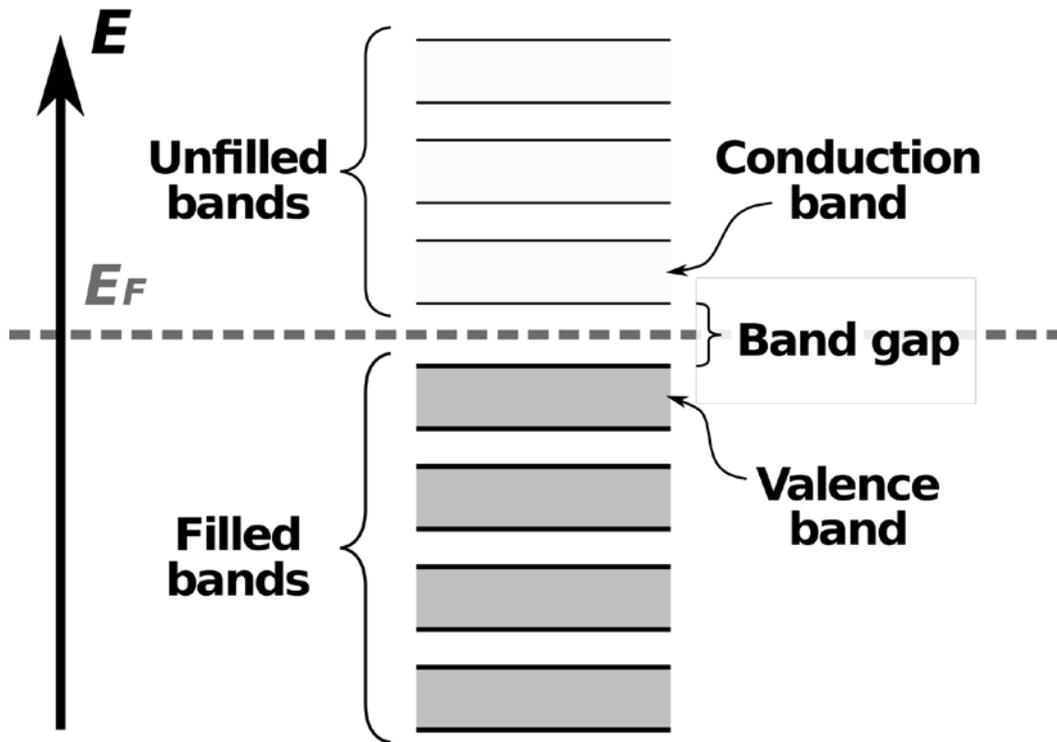


# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- Enlace metálico - Teoría de bandas

- Cada átomo de Li contribuye con un orbital 2s a la formación de dos orbitales moleculares:  $\sigma_{2s}$  y  $\sigma^*_{2s}$ .



- Los e- descritos como e-  $2s^1$  de los átomos de Li se sitúan en estos orbitales moleculares que quedan semilenos. Es decir, llenan el orbital  $\sigma_{2s}$  y dejan el  $\sigma^*_{2s}$  vacío.
- El resultado que se consigue es un conjunto de N orbitales moleculares con una separación muy pequeña entre cada par de niveles de energía sucesivos. Se denomina banda de energía.

[Representación esquemática de las bandas de energía de un sólido metálico](#)

Imagen por Mliu92 (Wikimedia Commons bajo la licencia Creative Commons Attribution-Share Alike 4.0 International)

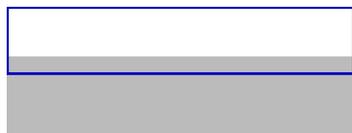


# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces



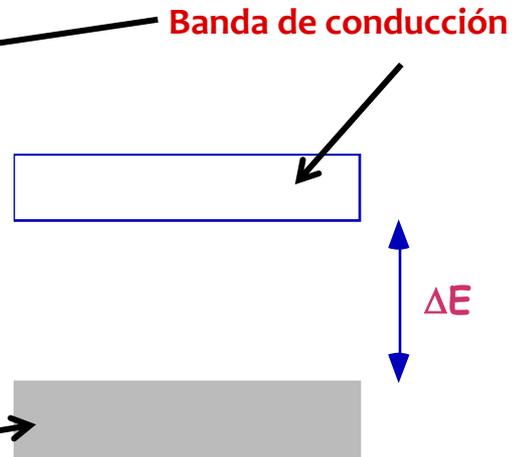
Metal



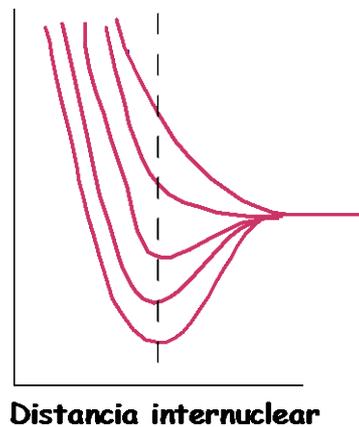
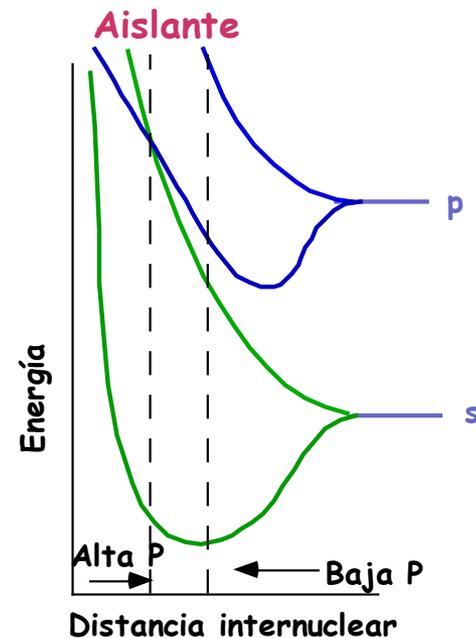
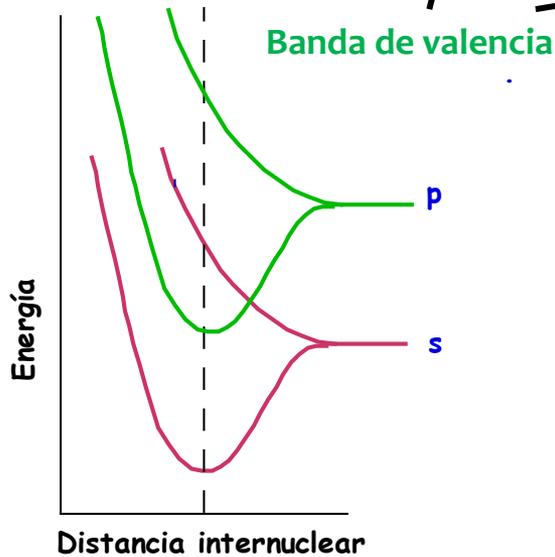
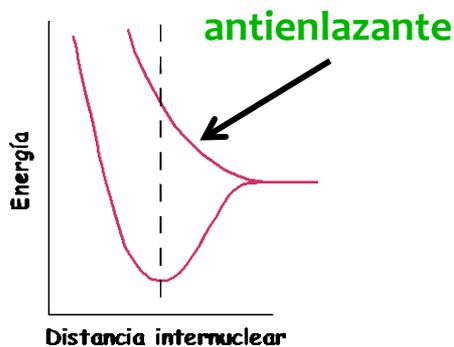
Metal



Semiconductor



Aislante



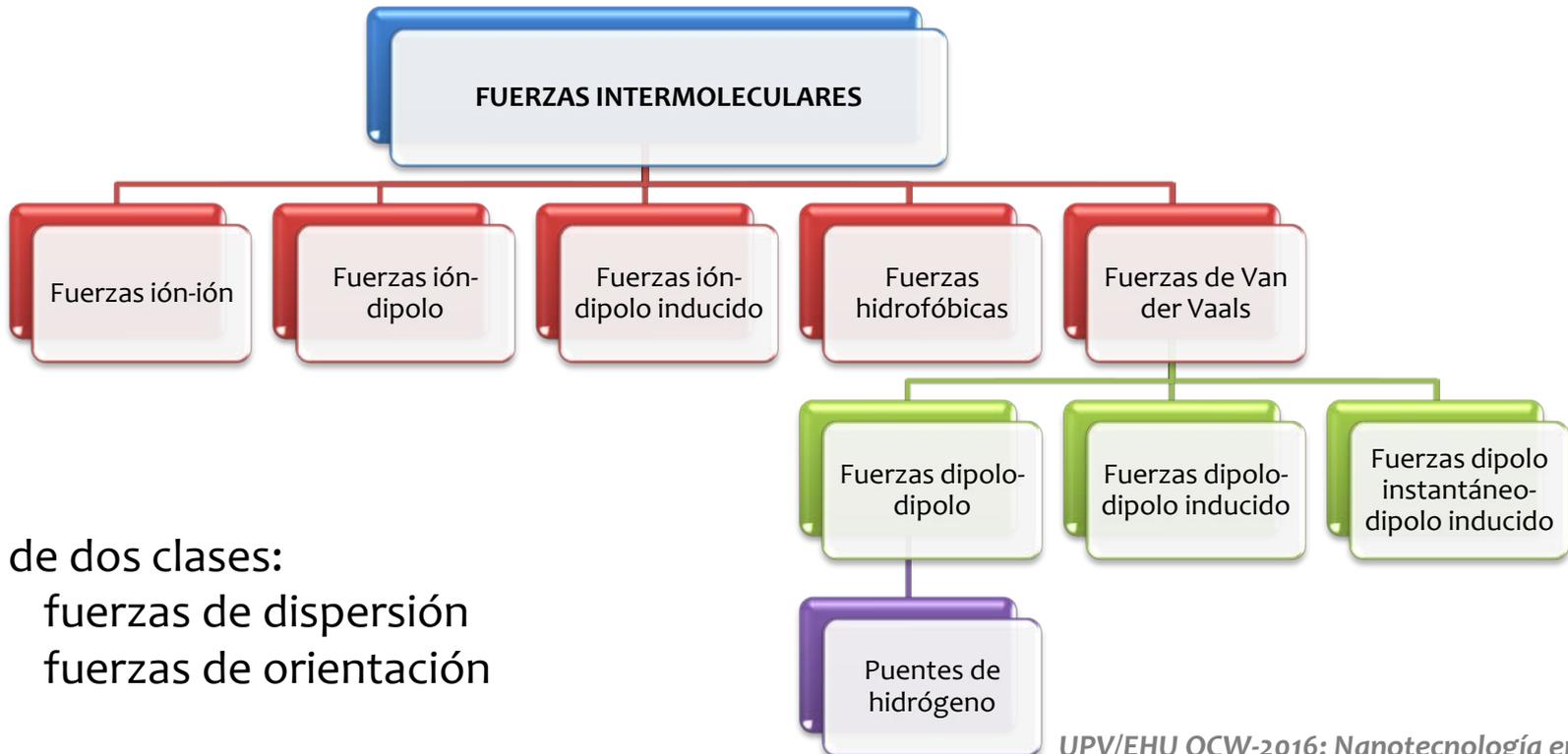


# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- **Fuerzas intermoleculares o de van der Waals**

- Se trata de interacciones entre átomos o moléculas, es decir, entre grupos atómicos saturados, que además son muy débiles y no estequiométricas y tienen lugar en los tres estados (sólido, líquido, gas).
- Son las fuerzas entre las moléculas que dan lugar a los cristales moleculares.



Son de dos clases:

- fuerzas de dispersión
- fuerzas de orientación



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- **Fuerzas de dispersión (o de London)**

- El movimiento de los electrones en el átomo da lugar a que en un momento concreto no coincida el centro geométrico de carga negativa de la nube electrónica con el centro geométrico de carga positiva del núcleo.
- Cada átomo se comporta como un pequeño dipolo instantáneo.
- Estas fuerzas aumentan con la masa atómica y con el volumen atómico.
- Su influencia se percibe en la variación de valor de los puntos de fusión o ebullición de las sustancias.

Sólido cristal	Fluor (F <sub>2</sub> )	Cloro (Cl <sub>2</sub> )	Bromo (Br <sub>2</sub> )	Yodo (I <sub>2</sub> )
Punto de fusión (°C)	- 218	-101	-7	114

- Estas fuerzas llegar a ser unas 1000 veces menores que el enlace covalente.
- Ejemplo: la energía del enlace covalente en el H<sub>2</sub> = 435 kJ/mol energía intermolecular entre dos moléculas de H<sub>2</sub> = 1 kJ/mol
- Pese a ser tan débiles pueden llegar a ser importantes por el elevado número que de ellas se forman en una sustancia. Y además existirán siempre, sea cual sea la sustancia.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

## Tipos de enlaces

- **Fuerzas de orientación**

- Se dan sólo en moléculas que son polares, dipolos permanentes (HCl, H<sub>2</sub>O..)
- Son fuerzas más intensas que las anteriores, pero tampoco llegan a constituir un verdadero enlace químico.
- Tanto en un caso como en el otro, se trata de fuerzas muy importantes, con gran repercusión en el comportamiento de la materia:
  - responsables de los estados de agregación
  - responsables de la licuación de los gases
  - responsables de que los gases no tengan un comportamiento ideal, etc.

- **El enlace de hidrógeno**

- Aparecen cuando en una molécula un átomo de hidrógeno está unido por un enlace covalente a un elemento muy electronegativo y pequeño (O, F, N, etc.)
- El tamaño tan pequeño del átomo de hidrógeno permite que ese otro átomo se le aproxime mucho, lo que da lugar a la aparición de esa unión, que representamos como (...). Así, el hidrógeno actúa como puente.



# LOS ÁTOMOS, LAS MOLÉCULAS Y LOS ENLACES

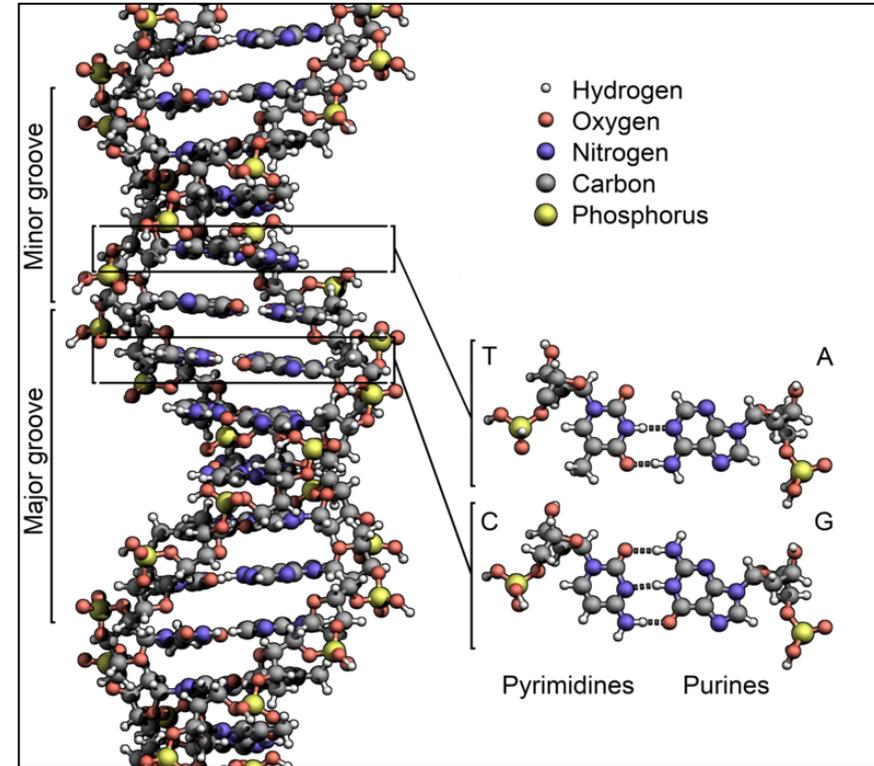
## Tipos de enlaces

### • El enlace de hidrógeno

– El enlace de hidrógeno tiene grandes repercusiones en las propiedades de la materia:

- Da lugar a que el  $H_2O$  tenga puntos de fusión y de ebullición mayores que los que cabría esperar ( $H_2O$  es líquida, y el  $H_2S$  es gas a pesar de su mayor masa molecular).
- Tiene una importantísima presencia en las moléculas biológicas, siendo responsable de la estructura helicoidal de las proteínas o ácidos nucleicos.
- En el núcleo de nuestras células se encuentra una molécula que se llama *ácido desoxirribonucleico* (ADN).

- El ADN lleva todas las instrucciones químicas necesarias para que las células sepan cómo trabajar.
- Está formado por unas sustancias denominadas **nucleótidos**. Cada uno de ellos, a su vez, está compuesto por un tipo de moléculas que se llaman *fosfatos*, un azúcar conocido como desoxirribosa y otras 4 moléculas (bases): adenina (A), timina (T), guanina (G) y citosina (C)
- James Watson y Francis Crick (1953) ➔ estructura del ADN



[Estructura del ADN](#)

Imagen de Zephyris (publicada en Wikipedia con licencia CC BY SA 3.0)



# LA NANOTECNOLOGÍA Y LOS ALIMENTOS

- **Imagina...**

- Una nanoemulsión bactericida que impida el crecimiento de microorganismos que causen el deterioro de alimentos y la producción de infecciones a través de alimentos
- Empleo de liposomas que protejan los nutrientes y los compuestos bioactivos → una absorción más eficiente en el intestino
- Unas nanofibras de proteína de verduras que cuando se mantienen unidas se parezcan a un pedazo de carne pero que en su producción se emplee menos energía
- ...

*“... the food industry believes that nanotechnology could deliver commercial benefits for the processing and preservation of food”*

Ref.: Aguilera, J.M. “Where Is the Nano in Our Foods?” J. Agric. Food Chem., 2014, 62 (41), 9953–9956



# LA NANOTECNOLOGÍA Y LOS ALIMENTOS

- **Imagina hasta dónde puede llegar el uso de nanopartículas en alimentación...**
  - Nanoestructuras de arcilla en botellas de plástico para aumentar el frescor.
  - Nanopartículas de Ag para proteger los alimentos de microorganismos.
  - Nanomicelas para distribuir y liberar aditivos alimenticios, sabores y olores.
  - ...
- **El empleo de nanoestructuras nos permite...**
  - Reducir los deshechos de alimentos
  - Mejora de la salud
  - Nuevas fuentes de productos de alimentación

*“... another potential detriment with nanoparticles is that their small size means they can travel to places in the body where other compounds physically cannot go”*

Ref.: Aguilera, J.M. “Where Is the Nano in Our Foods?” *J. Agric. Food Chem.*, 2014, 62 (41), 9953–9956





# LA NANOTECNOLOGÍA Y LOS ALIMENTOS

**Nanotecnología en alimentos naturales** – la mayor parte de componentes macromoleculares de los alimentos tienen nanodimensiones y a lo largo del procesado del alimento crecen dando lugar a microestructuras.

**Proteínas de la leche**

*Son sintetizadas en las células de las vacas y transportadas en el plasma o fase acuosa*

Caseína

Globulares

$\beta$ -lactoglobulina  
 $\alpha$ -lactoalbúmina

Forma nanofibras

Forma nanotubos

Native Denatured



$\beta$ -lactoglobulin



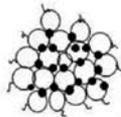
Fibers



Aggregates



$\kappa$ -casein subunit



Casein micelle



Milk gel

➤ La caseína se secreta en forma micelar (300 – 400 nm) – las subunidades de caseína se mantienen unidas mediante fosfato de calcio.

1 nm      10 nm      100 nm      1  $\mu$ m      10  $\mu$ m



# LA NANOTECNOLOGÍA Y LOS ALIMENTOS

## Nanotecnología en alimentos naturales

### Almidón

*Debe ser cocinado para liberar la amilosa y la amilopectina*

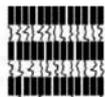
- Forma gránulos de entre 5 y 50  $\mu\text{m}$  y en su interior las moléculas de amilopectina se ordenan en capas semicristalinas de unos 10 nm de espesor, manteniendo las moléculas de amilosa entre dichas capas.
- Al cocinarse con un exceso de agua, esta estructura compleja colapsa, liberándose ambos polímeros.



Amylose



Amylopectin



Semi-crystalline arrangement in starch granule



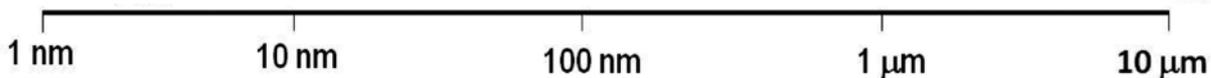
Extruded starch



Starch granule



Cooked starch granule



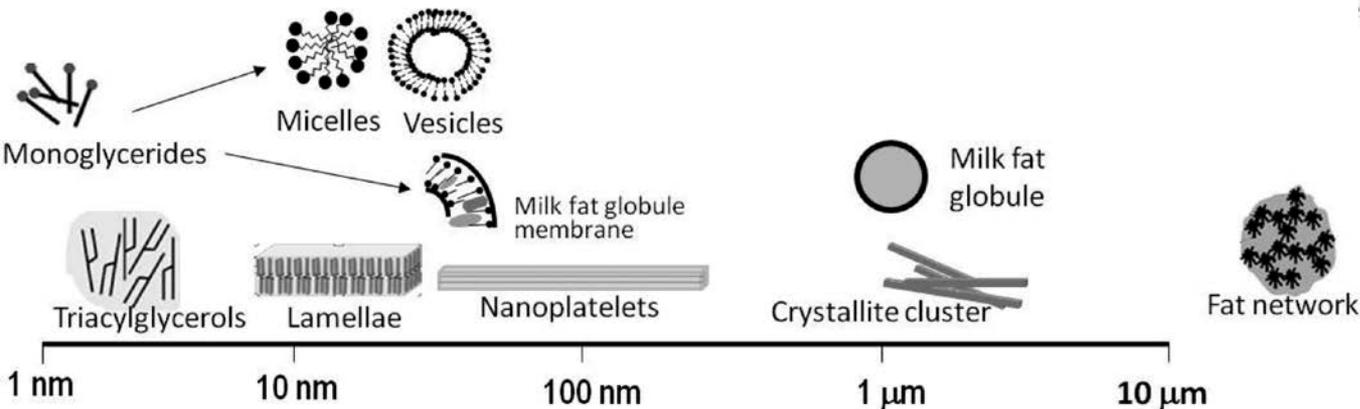


# LA NANOTECNOLOGÍA Y LOS ALIMENTOS

## Nanotecnología en alimentos naturales

### Lípidos

- Los glóbulos, que suelen presentar diámetros comprendidos entre 4 y 25  $\mu\text{m}$ , pueden contener en su interior muchos tipos de moléculas bioactivas.
- La mayoría de los lípidos que consumimos son triglicéridos que pueden cristalizar formando nanoplacas de 30-40 nm de espesor y hasta 370 nm de longitud.
- Estas nanoplacas pueden apilarse y clusterizarse conjuntamente en forma de agregados, llegando a dar lugar una red de grasa.



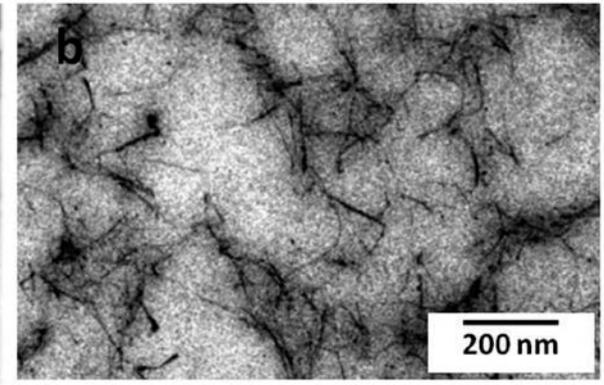
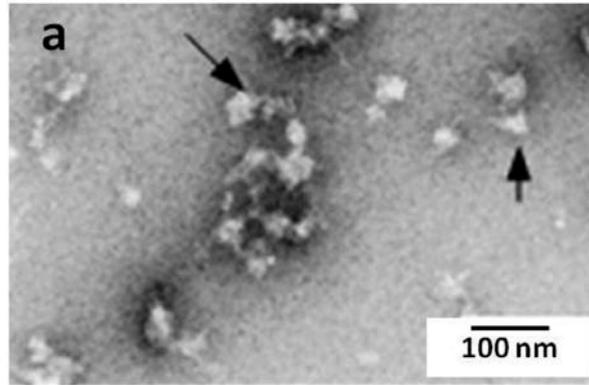
Se agrupan como pequeñas gotas formando vesículas



# LA NANOTECNOLOGÍA Y LOS ALIMENTOS

- Nanoestructuras “construidas”

- La mayor parte de los componentes de los alimentos tienen *nanodimensiones* y a lo largo del procesado sufren una serie de transformaciones que conllevan un aumento de escala.

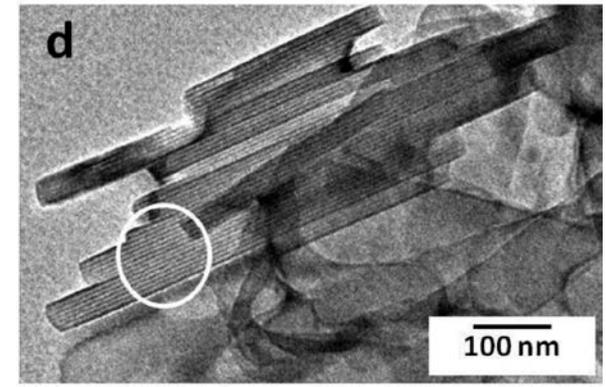
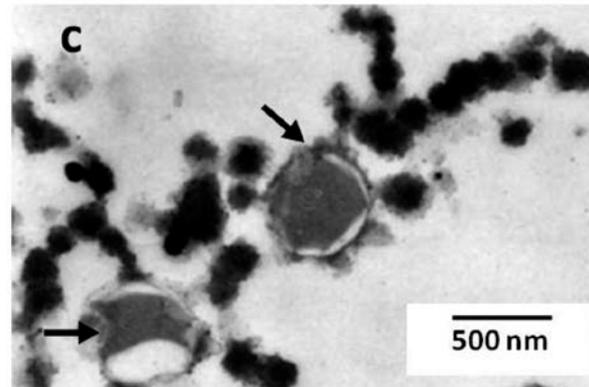


(a) Agregados de proteínas por calentamiento de  $\beta$ -lactoglobulina a 80 °C y pH 6.0

(b) Gel del 1%  $\kappa$ -carrageenan

(c) Gel tipo yogurt

(d) Red de cristales de grasa





# LA NANOTECNOLOGÍA Y LOS ALIMENTOS

- **Nanoestructuras “construidas”**

- Al machacar los dientes de ajo, se desencadenan ciertas reacciones enzimáticas responsables del olor y sabor característicos del ajo.
- El color verde de ciertos vegetales se preserva gracias a la clorofila (diámetro: 300 – 600 nm) en los cloroplastos.
- La pared de las legumbres (fuente de fibra) tiene un espesor de 300 – 1000 nm es un material compuesto de pectinas, ligninas, proteínas, ... todas ellas de tamaño nanométrico.
- Los filetes de carne poseen proteínas como la miosina y la actina (de 130 y 70 Å, respectivamente) y colágeno (diámetro de 200 nm).
- Al calentar las proteínas globulares de la leche, éstas se despliegan y se autoensamblan para dar fibras e incluso aglomerados que en el caso de la  $\beta$ -lactoglobulina (3,6 nm en estado nativo) presentan un tamaño comprendido entre 40 y 100 nm en función del pH del entorno. Estos agregados pueden unirse con la caseína dando lugar a geles “rígidos” como el yogurt.
- La harina de trigo está formada por glutenina (macropolímero) y gliadina (monómero) y al amasarla, las cadenas de glutenina se asocian dando una red en cuyos nanohuecos se acomoda la gliadina.



# LA NANOTECNOLOGÍA Y LOS ALIMENTOS

- **Nanoestructuras en alimentos – Conclusiones preliminares:**
  - Existen muchos tipos de nanoestructuras claramente identificadas en los alimentos que no son tóxicas y son fácilmente eliminables.
  - Estas nanoestructuras son fundamentales en las propiedades del alimento en lo que se refiere a textura/sabor/olor.
  - El desarrollo de nuevas nanoestructuras basadas en las naturales puede dar lugar a alimentos nuevos y funcionales
  - En cuanto a la toxicidad de las nanoestructuras, aunque se debe ser cauto, no se puede generalizar sobre su actividad biológica.