

LOS ELEMENTOS QUÍMICOS, SU MATEMÁTICA Y RELACIÓN CON EL SISTEMA PERIÓDICO

Guillermo Restrepo

Facultad de Ciencias, Escuela de Química, Universidad Industrial de Santander
Facultad de Ciencias, Universidad de Pamplona, Pamplona, Colombia
grestrepo@unipamplona.edu.co, khemeia@hotmail.com

RESUMEN

El sistema periódico de los elementos químicos visto como un conjunto de objetos definidos por sus propiedades físico-químicas, es susceptible de ser estudiado mediante matemática de conjuntos y topología general. En este trabajo hacemos una revisión de este estudio y resaltamos resultados como que la frontera matemática de los metales es un grupo de elementos semimetálicos y que los elementos alcalinos y gases nobles son elementos que guardan pocas relaciones de similitud con el resto de los elementos.

ABSTRACT

The periodic system of chemical elements view as a set of objects, all of them defined by their physico-chemical properties, can be studied through set mathematics and general topology. In this work we review this study and remark results such as that the mathematical boundary of metals is a group of elements semimetals. On the other hand we found that the alkaline metals and noble gases are elements which do not show similarities with the other elements.

PALABRAS CLAVES

Ley periódica, química matemática, análisis de agrupamientos, topología.

INTRODUCCIÓN

El 17 de febrero de 1869 [1], Mendeléiev 2 encontró las relaciones periódicas de los elementos químicos, pero tal vez lo más relevante de su descubrimiento no fueron estas relaciones, o las periodicidades de las propiedades con respecto al peso atómico (hoy al número atómico gracias a los trabajos de

Moseley [3]), sino la metodología que empleó para llegar a su descubrimiento. El científico ruso estudió los elementos químicos como un conjunto de objetos, fundamentándose en las propiedades que para ese entonces se conocían de ellos. Ese es a nuestro juicio el principal aporte de Mendeléiev a la química, una ciencia claramente relacional en la que

el conjunto y sus relaciones son de mayor importancia que los objetos individuales [4,5]. Pero esta visión conjuntista de la química no sólo tiene sentido al aplicarse a los elementos químicos, puede y de hecho ha empezado a dar sus mejores resultados en el campo de la química molecular, donde uno de sus mejores representantes es la metodología QSAR empleada para el diseño de nuevos fármacos tomando como base las relaciones encontradas entre diversos objetos moleculares de un conjunto de sustancias.

Investigaciones recientes [6,7,8] fundamentadas en la búsqueda de la similitud de los elementos químicos con base en sus propiedades, han revelado que gran parte de la estructura mostrada por el conjunto de los elementos, representada en los grupos y períodos de Mendeléiev, en el efecto diagonal, en el principio de singularidad y en el efecto del par inerte, puede ser explicada con base en la semejanza en las propiedades físico-químicas de los elementos, sin necesidad de recurrir a argumentos mecanocuánticos que adolecen de una cantidad pletórica de aproximaciones y que intentan reducir la química a la física.

SEMEJANZAS ENTRE LOS ELEMENTOS QUÍMICOS

Un discurso muy empleado por los docentes de química general de diversas universidades del mundo es el de exponer y “explicar” la tabla periódica como un ordenamiento de los elementos fundamentado en la configuración electrónica de los electrones de los átomos de los elementos químicos. Así,

es usual encontrar que el Li, Na, K, Rb, Cs y Fr son todos ellos similares debido a que tienen un electron en un orbital s de su nivel de valencia. También se suele decir que los gases nobles se caracterizan por tener sus orbitales s y p llenos. Ante esto podemos dar dos contraejemplos, primero, la configuración electrónica del H muestra un electrón en el orbital s de valencia y sin embargo el H no es considerado un elemento alcalino. Segundo, la configuración electrónica del He muestra el orbital s de valencia lleno y sin embargo es considerado un gas noble y no un elemento alcalinoterreo cuando el mismo argumento mecanocuántico indica que el He debería estar agrupado con ellos por poseer configuración electrónica s^2 . Estos dos ejemplos, además de otros más [9,10] muestran que la tabla periódica, una representación bidimensional de la ley periódica no se explica satisfactoriamente con argumentos mecanocuánticos [11]. Sin embargo, todo químico sabe que los elementos alcalinos se caracterizan porque sus óxidos al combinarse con agua producen hidróxidos, cosa que no ocurre con el óxido del hidrógeno, que resulta ser la misma agua. De la misma manera es bien conocido que el He debe ser un gas noble debido a su nula reactividad. En síntesis, es posible decir que la tabla periódica es un producto químico, basado en información química, como lo demuestran los trabajos de Mendeléiev, y que si intenta ser explicado desde la física no genera resultados satisfactorios.

¿Pero entonces cuál es la información que brinda la tabla periódica? La

respuesta es similitudes. El silicio fue reemplazado por el germanio en la búsqueda de nuevos materiales dieléctricos, que en últimas llevó al desarrollo del transistor; los químicos orgánicos reemplazan el Cl por el Br o el F en diversas sustancias con el fin de mejorar sus propiedades farmacológicas. Estos ejemplos son una muestra de la importancia del orden establecido por la tabla periódica.

¿QUÉ TAN SIMILARES SON LOS ELEMENTOS?

En el año 2000 fueron publicados dos artículos [6,7] que realizaban estudios de los elementos químicos tomando como base la similitud entre sus propiedades. Zhou, Wei, Chen, Fan, Zhan [6] realizaron el estudio de 50 elementos ($Z=1-50$) haciendo uso de 7 propiedades físicas. Algunos de los grupos encontrados fueron: {Co,Ni,Fe,Rh,Ru}, {Mo,Tc}, {Sc,Y,Ti}, {Ga,In,Sn}, {N,O,F,H}, {Cl,Br}, {Zn,Cd}, {Ar,Kr,Ne,He}, {Mg,Ca}, {Li,Na,K,Rb}, {Cu,Ag} y {B,C}, donde resalta la aparición de los grupos de elementos alcalinos y gases nobles. Finalmente, haciendo uso de esta misma metodología, Sneath [7] estudió 69 elementos ($Z=1-83$, omitiendo $Z=58-71$) a partir de 54 propiedades físico-químicas. Dentro de los grupos encontrados se destacan: {He,Ne,Ar,Kr,Xe}, {N,P}, {S,Se}, {Cl,Br}, {O,F}, {B,Si,C}, {Ti,V}, {As,Sb,Te}, {Zn,Cd,In}, {Hg,Tl,Pb,Bi}, {Cr,Mn,Fe,Co,Ni}, {Zr,Hf}, {Nb,Ta,W,Mo,Re}, {Cu,Ag,Au}, {Tc,Ru,Os,Ir}, {Rh,Pd,Pt}, {Be,Al}, {Li,Na,K,Rb,Cs}, {Mg,Ca,Sr,Ba} y {Sc,Y,La}, donde es importante resaltar la aparición de los grupos alcalinos,

alcalinotérreos y gases nobles, además de otros fragmentos de grupos de la Tabla Periódica. En la investigación de Sneath de las 54 propiedades sólo 14 pertenecen a elementos químicos; las demás están relacionadas con algunos de sus compuestos.

Finalmente, nuestro grupo de investigación [8], a principios de 2004 realizó un estudio de 72 elementos químicos ($Z=1-86$, omitiendo $Z=58-71$) tomando como base las similitudes en un conjunto de 31 propiedades físico-químicas. Los resultados mostraron agrupaciones conocidas por los químicos como las de los elementos alcalinos, alcalinotérreos, pnícógenos, calcógenos, halógenos y gases nobles. Es decir, agrupaciones del sector representativo de la tabla periódica convencional. Sin embargo las agrupaciones de los elementos de transición no mostraron patrones del todo mostrados por la tabla periódica, como es el caso del Fe, Co, In. Por otra parte, como lo han mostrado diferentes autores [12,13,14], la tabla periódica no muestra todas las relaciones de semejanza de los elementos químicos, existen algunas relaciones que pasan desapercibidas al orden establecido por la tabla convencional, como son:

Principio de singularidad [13,15], que establece que la química de los elementos del segundo período es diferente de la del resto de elementos de sus respectivos grupos.

Efecto diagonal [13,15], que considera las semejanzas diagonales entre el comportamiento químico del primer

elemento de un grupo y el segundo del grupo siguiente (a la derecha en la tabla periódica convencional).

Efecto del par inerte [13,15], que establece que en algunos grupos, los elementos que siguen al segundo y tercer periodos de transición muestran estados de oxidación dos veces menor que el máximo de los elementos de sus respectivos grupos.

En nuestra investigación, estas relaciones son notorias en los agrupamientos encontrados.

SOBRE LAS VECINDADES Y LA MATEMÁTICA DE LOS ELEMENTOS

Las tres investigaciones mencionadas en la sección anterior [6,7,8] realizaron los estudios de semejanza de los elementos mediante una técnica quimiométrica conocida como análisis de agrupamientos, ampliamente desarrollada en biología por Sneath [16] y de creciente aplicación en química [17,18,19,20]. Sin embargo, sólo una de ellas intenta profundizar matemáticamente en el sentido químico y matemático de los agrupamientos [8]. Esta investigación es la desarrollada por nosotros, en la cual tomando como base lo que se ha denominado la “conjetura de Villaveces” [21], desarrollamos una investigación matemática de los elementos químicos.

¿Pero qué es y de dónde surge la conjetura de Villaveces? En un artículo publicado en una revista colombiana de epistemología [5], Villaveces esbozó la idea de que el conjunto de los elementos químicos, con sus relaciones de vecindad

en cuanto a sus propiedades, parece ser un espacio topológico. Esta idea surge de la estrecha relación entre la química y la matemática que la química teórica colombiana ha estado consolidando desde hace algo más de quince años y que se ha representado en varias publicaciones internacionales [8,19,22] y en varios capítulos de libros especializados [21,23].

Ahora bien, surge la pregunta sobre la topología, ¿qué es esto? Es una teoría matemática estrechamente relacionada con la teoría de conjuntos [24,25], que establece, en pocas palabras, que si se tiene un conjunto y se conocen las relaciones entre sus elementos, es posible estudiar algunas propiedades del conjunto como fronteras y adherencias de los elementos del conjunto.

En el caso de los elementos químicos, el análisis de agrupamientos brinda la posibilidad de conocer las relaciones entre los elementos, estas relaciones son relaciones de vecindad en cuanto a sus propiedades y si conocemos las vecindades y el conjunto podemos hablar de una topología sobre los elementos químicos. Así pues, con base en los agrupamientos encontrados por las metodologías quimiométricas, describimos una topología para el conjunto de los elementos químicos y posteriormente calculamos algunas propiedades topológicas como adherencias, conjuntos derivados y fronteras de algunos subconjuntos de elementos químicos de interés [4,8,21]. Dentro de los resultados obtenidos encontramos que los grupos de elementos de los extremos de la tabla

periódica convencional muestran propiedades robustas tales como que no se relacionan con otros elementos y que su frontera es vacía, esto en términos químicos indica que son grupos de elementos bastante disímiles del resto de los elementos químicos. Por otra parte, quizá el resultado más sorprendente de nuestra investigación, es el que la frontera matemática del conjunto de los metales y los no metales resultan ser algunos de los elementos que desde la antigüedad han sido considerados intuitivamente como semimetales [26], es decir, con propiedades intermedias entre las de los metales y no metales. Este resultado no es novedoso, de hecho los alquimistas lo conocían, lo novedoso resulta de la forma estricta en que fue obtenido, aplicando herramientas matemáticas. Lo cual hace pensar en la veracidad de la conjetura de Villaveces [21].

CONCLUSIONES

Las diversas investigaciones que se han realizado sobre las relaciones de semejanza entre los elementos químicos tomando como base sus propiedades, han llevado a la reproducción parcial de las agrupaciones mostradas por la tabla periódica convencional, lo cual indica, a pesar de los esfuerzos de la física cuántica, que la química puede ser entendida sin necesidad de reduccionismos precipitados. Es más, que la química, como ciencia experimental, puede ser interpretada y construida desde los experimentos mismos. Por otra parte, la aplicación de herramientas matemáticas al estudio de información experimental química, como lo demuestra nuestra investigación

topológica de los elementos químicos, es una evidencia de que la química es una ciencia relacional y que el estudio de estas relaciones con rigor matemático lleva al asentamiento de ideas conocidas por los químicos desde años remotos.

Existen claras evidencias de una estructura topológica subyacente al conjunto de los elementos químicos, la cual es responsable de las bien conocidas tendencias periódicas de los elementos químicos, además de algunas nuevas relaciones no antes estudiadas, como la del Fe, Co, In.

Dentro de los grupos usuales de la tabla periódica, encontramos algunos de ellos como agrupaciones robustas, en el sentido de que están autocontenidos y no se relacionan con elementos ajenos a sus familias. Otros grupos, particularmente los elementos de transición, no muestran este comportamiento.

Por otra parte, propiedades no periódicas de los elementos, como la metalicidad y no metalicidad muestran un fuerte comportamiento topológico. La metalicidad es bien conocida desde tiempos antiguos y fue el fundamento de la química moderna a través de los trabajos de Lavoisier y Berzelius, sin embargo no existe una definición rigurosa de su significado.

Finalmente, hemos mostrado que el uso de la topología para analizar el conjunto de los elementos químicos es una herramienta versátil. Además, la conjetura de que los elementos químicos parecen ser un espacio topológico resulta evidente.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 KAJI, M. Mendeleev's discovery of the periodic law: the origin and the reception. *Foundations of Chemistry*. 2003, 5, 189–214.
- 2 MENDELEEV, D. On the Relationship of the Properties of the Elements to their Atomic Weights. *Zeitschrift für Chemie*, 1869, 12, 405-406. (en línea) 1 ed. (citado 12 ag. 2002) Disponible en internet en: <http://webserver.lemoyne.edu/faculty/giunta/mendeleev.html>
- 3 MOSELEY, H. G. J. The High Frequency Spectra of the Elements. *Philosophical Magazine*. 1913, 1024. (en línea) 1 ed. (citado 12 ag. 2001) Disponible en internet en: <http://dbhs.wvusd.k12.ca.us/Chem-History/Moseley-article.html>
- 4 RESTREPO, G.; MESA, H.; VILLAVECES, J. L. Estructura matemática de la Ley Periódica y su posible extrapolación a sistemas complejos. V Seminarios de estudios avanzados en diseño molecular y bioinformática. La Habana: Universidad de La Habana, 2004.
- 5 VILLAVECES, J. L. Química y Epistemología: una relación esquivada. *Revista Colombiana de Filosofía de la Ciencia*, 2000, 1, 9-26.
- 6 ZHOU, X-Z.; WEI, K-H.; CHEN, G-Q.; FAN, Z-X.; ZHAN, J-J. Fuzzy Cluster Analysis of Chemical Elements. *Jisuanji Yu Yingyong Huaxue*, 2000, 17, 167-168.
- 7 SNEATH, P. H. A. Numerical Classification of the Chemical Elements and its relation to the Periodic System. *Foundations of Chemistry*, 2000, 2, 237-263.
- 8 RESTREPO, G.; MESA, H.; LLANOS, E. J.; VILLAVECES, J. L. Topological study of the periodic system *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 2004, 44, 68-75
- 9 SCERRI, E. R.; KREINOVICH, V.; WOJCIECHOWSKI, P.; YAGER, R. R. Ordinal explanation of the periodic system of chemical elements. *Int. J. Uncertainty, Fuzziness and Knowledge-Based Systems*, 1998, 6, 387-400.
- 10 SCERRI, E. Has the Periodic Table been successfully axiomatized? *Erkenntnis*, 1997, 47, 229-243.
- 11 RESTREPO, G. Búsqueda de la estructura matemática de la ley periódica, Bucaramanga, 2004. Tesis de maestría (Magister en química). Universidad Industrial de Santander. Facultad de Química.
- 12 RAYNER-CANHAM, G.; OVERTON, T. *Descriptive Inorganic Chemistry*, W. H. Freeman, New York, 2003.
- 13 RAYNER-CANHAM, G. Periodic Patterns. *Journal of Chemical Education*, 2000, 77, 1053.
- 14 LAING, M. Periodic Patterns (re *J. Chem. Educ.* 2000, 77, 1053-1056). *Journal of Chemical Education*. 2001, 78, 877.
- 15 RODGERS, G. E. *Química Inorgánica*, McGraw-Hill, Madrid, 1995; Chapter 9, 255-280.
- 16 SOKAL, R. R.; SNEATH, P. H. A. *Principles of Numerical Taxonomy*, W. H. Freeman and Company, San Francisco, 1963; 78-194.
- 17 TORRENS, F. Table of Periodic Properties of Fullerenes Based on Structural Parameters. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 2004, 44, 60-67

¹⁸ SUZUKI, T.; IDE K.; ISHIDA, M.; SHAPIRO, S. Classification of Environmental Estrogens by Physicochemical Properties Using Principal Component Analysis and Hierarchical Cluster Analysis. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*. 2001, 41, 718-726.

¹⁹ CÁRDENAS, C.; OBREGÓN, M.; LLANOS, E. J.; MACHADO, E.; BOHÓRQUEZ, H. J.; VILLAVECES, J. L.; PATARROYO, M. E. Constructing a useful tool for characterizing amino acid conformers by means of quantum chemical and graph theory indices, *Computers & Chemistry*. 2002, 26, 667-682.

²⁰ BULTINCK, P.; CARBÓ-DORCA, R. Molecular Quantum Similarity Matrix Based Clustering of Molecules Using Dendrograms, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*. 2003, 43, 170-177.

²¹ RESTREPO, G.; MESA, H.; LLANOS, E. J.; VILLAVECES, J. L. Topological study of the periodic system. En: *The mathematics of the periodic table*, Nova publishers, New York, 2004, en impresión.

²² NIÑO, M.; DAZA, E. E.; TELLO, M. A Criteria To Classify Biological Activity of Benzimidazoles from a Model of Structural Similarity. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*. 2001, 41, 495-504.

²³ DAZA, E. E.; VILLAVECES, J. L. The concept of molecular structure. En: *Concepts in Chemistry, a contemporary challenge*. New York, John Wiley & Sons Inc, 1997

²⁴ MENDELSON, B. *Introduction to Topology*, 3rd ed.; Dover: New York, 1990; Chapter 2, 29-69.

²⁵ BONCHEV, D.; ROUVRAY D. H. En: *Chemical Topology*; Gordon and Breach Science Publishers: Amsterdam, 1999; Prefase, pp xiii-xiv.

²⁶ HAWKES, S. J. Semimetallicity? *Journal of Chemical Education*. 2001, 78, 1686-1687.

¹ KAJI, M. Mendeleev's discovery of the periodic law: the origin and the reception. *Foundations of Chemistry*. 2003, 5, 189-214.

² MENDELEEV, D. On the Relationship of the Properties of the Elements to their Atomic Weights. *Zeitschrift für Chemie*, 1869, 12, 405-406. (en línea) 1 ed. (citado 12 ag. 2002) Disponible en internet en:

<http://webserver.lemoyne.edu/faculty/giunta/mendeleev.html>

³ MOSELEY, H. G. J. The High Frequency Spectra of the Elements. *Philosophical Magazine*. 1913, 1024. (en línea) 1 ed. (citado 12 ag. 2001) Disponible en internet en: <http://dbhs.wvusd.k12.ca.us/Chem-History/Moseley-article.html>

⁴ RESTREPO, G.; MESA, H.; VILLAVECES, J. L. Estructura matemática de la Ley Periódica y su posible extrapolación a sistemas complejos. V Seminarios de estudios avanzados en diseño molecular y bioinformática. La Habana: Universidad de La Habana, 2004.

⁵ VILLAVECES, J. L. Química y Epistemología: una relación esquivada. *Revista Colombiana de Filosofía de la Ciencia*, 2000, 1, 9-26.

⁶ ZHOU, X-Z.; WEI, K-H.; CHEN, G-Q.; FAN, Z-X.; ZHAN, J-J. Fuzzy Cluster Analysis of Chemical Elements. *Jisuanji Yu Yingyong Huaxue*, 2000, 17, 167-168.

⁷ SNEATH, P. H. A. Numerical Classification of the Chemical Elements and its relation to the Periodic System. *Foundations of Chemistry*, 2000, 2, 237-263.

⁸ RESTREPO, G.; MESA, H.; LLANOS, E. J.; VILLAVECES, J. L. Topological study of the periodic system *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 2004, 44, 68-75

- ⁹ SCERRI, E. R.; KREINOVICH, V.; WOJCIECHOWSKI, P.; YAGER, R. R. Ordinal explanation of the periodic system of chemical elements. *Int. J. Uncertainty, Fuzziness and Knowledge-Based Systems*, 1998, 6, 387-400.
- ¹⁰ SCERRI, E. Has the Periodic Table been successfully axiomatized? *Erkenntnis*, 1997, 47, 229-243.
- ¹¹ RESTREPO, G. Búsqueda de la estructura matemática de la ley periódica, Bucaramanga, 2004. Tesis de maestría (Magister en química). Universidad Industrial de Santander. Facultad de Química.
- ¹² RAYNER-CANHAM, G.; OVERTON, T. *Descriptive Inorganic Chemistry*, W. H. Freeman, New York, 2003.
- ¹³ RAYNER-CANHAM, G. Periodic Patterns. *Journal of Chemical Education*, 2000, 77, 1053.
- ¹⁴ LAING, M. Periodic Patterns (re *J. Chem. Educ.* 2000, 77, 1053-1056). *Journal of Chemical Education*. 2001, 78, 877.
- ¹⁵ RODGERS, G. E. *Química Inorgánica*, McGraw-Hill, Madrid, 1995; Chapter 9, 255-280.
- ¹⁶ SOKAL, R. R.; SNEATH, P. H. A. *Principles of Numerical Taxonomy*, W. H. Freeman and Company, San Francisco, 1963; 78-194.
- ¹⁷ TORRENS, F. Table of Periodic Properties of Fullerenes Based on Structural Parameters. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 2004, 44, 60-67
- ¹⁸ SUZUKI, T.; IDE K.; ISHIDA, M.; SHAPIRO, S. Classification of Environmental Estrogens by Physicochemical Properties Using Principal Component Analysis and Hierarchical Cluster Analysis. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*. 2001, 41, 718-726.
- ¹⁹ CÁRDENAS, C.; OBREGÓN, M.; LLANOS, E. J.; MACHADO, E.; BOHÓRQUEZ, H. J.; VILLAVECES, J. L.; PATARROYO, M. E. Constructing a useful tool for characterizing amino acid conformers by means of quantum chemical and graph theory indices, *Computers & Chemistry*. 2002, 26, 667-682.
- ²⁰ BULTINCK, P.; CARBÓ-DORCA, R. Molecular Quantum Similarity Matrix Based Clustering of Molecules Using Dendrograms, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*. 2003, 43, 170-177.
- ²¹ RESTREPO, G.; MESA, H.; LLANOS, E. J.; VILLAVECES, J. L. Topological study of the periodic system. En: *The mathematics of the periodic table*, Nova publishers, New York, 2004, en impresión.
- ²² NIÑO, M.; DAZA, E. E.; TELLO, M. A Criteria To Classify Biological Activity of Benzimidazoles from a Model of Structural Similarity. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*. 2001, 41, 495-504.
- ²³ DAZA, E. E.; VILLAVECES, J. L. The concept of molecular structure. En: *Concepts in Chemistry, a contemporary challenge*. New York, John Wiley & Sons Inc, 1997
- ²⁴ MENDELSON, B. *Introduction to Topology*, 3rd ed.; Dover: New York, 1990; Chapter 2, 29-69.
- ²⁵ BONCHEV, D.; ROUVRAY D. H. En: *Chemical Topology*; Gordon and Breach Science Publishers: Amsterdam, 1999; Prefase, pp xiii-xiv.
- ²⁶ HAWKES, S. J. Semimetallicity? *Journal of Chemical Education*. 2001, 78, 1686-1687.