

Eje temático: Historia y epistemología de la Química y de su enseñanza

DE LEWIS A PAULING: LA ENSEÑANZA DEL CONCEPTO DE ENLACE QUÍMICO

S. Porro y D. I. Roncaglia (*)

GIECIEN (Grupo de Investigación en Enseñanza de las Ciencias) Departamento de Ciencia y Tecnología, Universidad Nacional de Quilmes (UNQ), Sáenz Peña 352 (1876) Bernal, Buenos Aires, Argentina.

E-mail: diana.roncaglia@unq.edu.ar

Resumen

Presentamos aquí una breve reseña histórica de los conceptos relacionados al enlace químico (EnQ) para ser empleado y/o profundizado por los docentes del nivel medio y primeros cursos universitarios. Se discute el recorrido que realizaron los científicos pioneros desde comienzos del siglo XX, comenzando con el Modelo de Lewis hasta el surgimiento de la Mecánica Cuántica y su aplicación a las teorías de enlace realizada por Pauling.

Palabras claves: enlace químico, historia de la química, didáctica de la Química, G.N. Lewis, L. Pauling

Introducción

Desde el momento en que los científicos imaginaron que las partículas que componían las sustancias estaban formadas por átomos unidos surgió la pregunta acerca de la manera en que los átomos se unen para formar compuestos y su capacidad para enlazarse.

Se considera que la historia del concepto de valencia se inicia con las leyes de las proporciones definidas y múltiples, a partir de las cuales Thomas Thomson (1813) pudo concluir que cada elemento tiene un número característico de puntos de unión, coincidiendo con lo que, 40 años después, propuso Edward Frankland [1] al decir que cada elemento tiene una "atomicidad" definida, considerada como la *capacidad de combinación de los átomos de cada elemento*. Posteriormente, y gracias al desarrollo de los modelos atómicos, se estableció la relación entre los electrones más externos del átomo y la capacidad de combinación de los mismos, y se propuso como valencia de un átomo el número de electrones de su capa más externa. Este último fue el concepto de valencia que utilizaron Lewis en 1916 y 1923 [2,3] y Langmuir en 1919 [4] para desarrollar sus teorías del enlace químico, y el que permaneció hasta que Linus Pauling [5] lo explicó desde la mecánica cuántica.

Fundamentos didácticos

El enlace químico (EnQ) es uno de los conceptos claves en Química, de hecho, muchos otros conceptos químicos enseñados en los niveles medios y en los primeros años de la educación superior, están basados en la comprensión de las ideas fundamentales relacionadas a este concepto.

Aprender sobre EnQ permite hacer predicciones y dar explicaciones acerca de las propiedades físicas y químicas de las sustancias [6].

En la enseñanza de la ciencia, es necesario presentar las ideas de forma que sean auténticas representaciones de los conceptos científicos, suficientemente simplificadas como para ser comprendidas por los estudiantes y tener en cuenta que el propósito, en los niveles de educación básico y medio, *es educar en ciencias y no formar científicos*, ya que esto le concierne a las instituciones de educación superior. Existe una relación inseparable entre la historia de las ciencias y su enseñanza, desconocerla lleva a la ciencia a ser considerada como una empresa individual y absolutista, que muestra una única verdad. La inserción de la historia en la enseñanza de las ciencias debe permitir a los estudiantes realizar la construcción y reconstrucción de sus estructuras conceptuales, metodológicas, actitudinales y axiológicas [7].

El Modelo de Lewis y su evolución

La principal contribución de Lewis a la Química fue la idea, basándose exclusivamente en evidencia química, que el EnQ (llamado enlace covalente por Langmuir) se forma cuando 2 átomos comparten pares de electrones y son estos pares quienes mantienen juntos a los átomos. El artículo en el que plantea esta idea revolucionó la Química. Por otro lado, I. Langmuir en su dos artículos de 1919 [4], realizó aportes y adiciones al concepto propuesto por Lewis, aunque por alguna extraña razón Lewis fue antagonista de Langmuir.

La teoría de enlace [4] fue creada muchos años antes que se desarrollaran los cálculos de la Mecánica Cuántica (MC) para moléculas, a pesar de lo cual la teoría sobrevivió bastante bien hasta hoy. De hecho la MC ha obtenido estructuras similares en muchos tipos de moléculas (analizando las funciones de onda o las densidades electrónicas). Sin embargo, la teoría de Lewis necesitó ser modificada para encontrar consistencia en el caso de aquellas moléculas que tenían enlaces polares o átomos hipervalentes, como PF_5 y SF_6 .

Lewis postuló que los pares de electrones en una molécula pueden representarse escribiendo las fórmulas: a) compuesto iónico $[\text{Na}]^+[\text{H}]^-$ b) compuesto covalente $\text{H}:\text{H}$.

Esta representación es indicativa de que la densidad electrónica está concentrada, según White [8] donde los electrones pasan la mayor parte del tiempo. Así la fórmula a) nos dice que los electrones pasan la mayor parte del tiempo cerca del H, y b) la mayor parte del tiempo entre los H, mientras que los electrones se ubican lo más alejados uno del otro.

La entrada de la Mecánica Cuántica (MC):

La teoría Cuántica comenzó en 1900 con el descubrimiento hecho por Max Planck de la Ley de la radiación, que introduce una nueva constante física, la constante de Planck ($h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J.s}$).

En solo algunos años Albert Einstein utilizó esta teoría para explicar el efecto fotoeléctrico, el equivalente fotoquímico de la ley de la radiación y las capacidades caloríficas de los sólidos a baja temperatura. Niels Bohr la empleó para interpretar los espectros atómicos con un éxito considerable pero no completo. Hacia 1920 se reconoció que la "vieja teoría cuántica" debía ser revisada.

Esta revisión estuvo acompañada por los descubrimientos de Werner Heisenberg, Paul Dirac y Ernest Schrödinger entre 1925 y 1926.

Linus Pauling llegó a Alemania en 1926, justo cuando E. Schrödinger había publicado sus artículos acerca de la ecuación de ondas. A fines de 1926 Pauling ya había escrito 2 trabajos aplicando la MC para determinar ciertas propiedades físicas de átomos e iones monoatómicos y comenzó a trabajar para aplicar la MC al problema del EnQ.

La prominencia de Pauling está asociada a la aplicación de la MC para explicar el EnQ. En una serie de artículos que comenzaron en 1931 [9], Pauling aplica la MC al EnQ con poca aceptación debido al uso de aproximaciones, que justificaba detalladamente en sus cálculos, solo para moléculas diatómicas pero que generalizó para las poliatómicas. Fue muy criticado por describir moléculas como el benceno como híbrido de resonancia entre las dos estructuras de Kekulé. En un artículo publicado en 1970, Pauling defendió la resonancia en conexión con la teoría estructural clásica [10]:

"Los enlaces son construcciones teóricas, idealizaciones que hicieron los químicos durante los últimos 100 años para desarrollar convenientemente la invaluable teoría estructural clásica de la química orgánica..... las estructuras clásicas y los enlaces están de acuerdo con una extensa evidencia física y química. La teoría de resonancia es avalada por su propio éxito como un "nuevo principio estructural semiempírico" que es compatible con la MC y está de acuerdo con los datos obtenidos experimentalmente."

La teoría cuántica "inicial" podía reproducir solamente los valores experimentales de átomos simples pero no moléculas. Más adelante, Heisenberg, aplicó la teoría de resonancia para explicar el espectro del átomo de He, y Burrau realizó un cálculo muy exacto de la energía de enlace del H_2^+ ; estos primeros pasos fueron seguidos por el tratamiento de los enlaces como pares de electrones por Heitler y London, y por muchísimas otras aplicaciones de la MC a la química.

La contribución fundamental de Pauling fue aplicar los métodos de la MC a las estructuras electrónicas estáticas de Lewis, interpretando los estados cuánticos de una molécula como superposición de estructuras unidas clásicamente.

El concepto de resonancia de la MC y el teorema que plantea que la estructura real de un sistema es aquella que posee la menor energía terminó siendo esencial para la química. El teorema de mínima energía dio lugar a la formulación de la escala de electronegatividad, la Química Moderna y la Biología Molecular.

Conclusión

Los primeros cursos de química deben enfatizar los aspectos simples de la estructura molecular en relación a las propiedades macroscópicas de las sustancias. Estos aspectos incluyen la estructura electrónica de los átomos, remarcando la noción de niveles electrónicos completos, compartición de electrones en los enlaces, la escala de electronegatividad, el carácter iónico parcial de los enlaces y la idea de resonancia. La secuencia histórica de los hechos, teóricos y experimentales ayudará sin dudas a conectar y comprender el concepto de EnQ y los modelos que lo describen.

Bibliografía

[1] "Lecture notes for chemical students embracing mineral and organic chemistry" Frankland, Edward. Éd. J. Van Voorst (London) (1866) Identificador: ark:/12148/bpt6k96151f Fuente: Bibliothèque de l'Ecole polytechnique. Consultado 3/06/2015.

[2] G. N. Lewis (1916) *J. Amer Chem. Soc.* **38**, 7621.

[3] G.N. Lewis, "Valence and the Structure of Atom and Molecules." Ed. Chemical Catalog, Co. New York (1923).

[4] I. Langmuir (1919) *J. Amer. Chem. Soc.* **41**, 868, 1543 (1919).

[5] L. Pauling (1928) *Chemical Rev.* **5**, 173–213.

[6] J. Solbes y M.J. Traver, (1996) *Revista enseñanza de las ciencias* **14(1)**, 103-110.

[7] A. Schnek "¿Qué aporta la historia de las ciencias a la enseñanza de las ciencias naturales?" En ¿Qué tienen de "naturales" las ciencias naturales? Buenos Aires: Ed. Biblos, capítulo 4 (2008).

[8] H.E. White (1931) *Phys. Rev.* **38**, 512-520.

[9] L. Pauling (1932) *J. Am. Chem. Soc.* **54** 3570- 3582.

[10] L. Pauling, (1970) *Daedalus* **99**, 988–1014.