

EPISTEMOLOGÍA E HISTORIA DE LA CIENCIA

SELECCIÓN DE TRABAJOS DE LAS XX JORNADAS

VOLUMEN 16 (2010)

Pío García
Alba Massolo

Editores



ÁREA LOGICO-EPISTEMOLÓGICA DE LA ESCUELA DE FILOSOFÍA
CENTRO DE INVESTIGACIONES DE LA FACULTAD DE FILOSOFÍA Y HUMANIDADES
UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA



Esta obra está bajo una Licencia Creative Commons atribución NoComercial-SinDerivadas 2.5 Argentina



Las naturalezas del enlace químico

Martín Labarca* • Mariano Lastiri**

1. Introducción

En un trabajo previo (Labarca y Lastiri, 2006) analizamos la posibilidad de tejer relaciones entre la concepción estructuralista de las teorías científicas y el realismo pluralista pragmático. Señalamos allí que ambos enfoques indican que un pluralismo tanto en el plano epistemológico como en el ontológico es una manera adecuada de comprender la imagen del mundo que nos proporciona la ciencia: una realidad estratificada organizada en múltiples niveles ontológicos, cada uno de los cuales está vinculado a los restantes mediante nexos nomológicos no reductivos.

El presente trabajo se propone profundizar el análisis anteriormente presentado mediante la discusión de un ejemplo concreto de relación interteórica. El concepto de enlace químico puede describirse utilizando tanto teorías químicas como teorías mecánico cuánticas. Analizaremos la forma en que este término aparece en la teoría de Lewis y la teoría de los orbitales moleculares, así como las relaciones entre éstas. Omitiremos esta vez, el uso de herramientas estructuralistas, ya que un análisis pormenorizado de este tipo requeriría una extensión considerablemente más amplia que la disponible. Tal tarea, fundamental como es para un problema como el que enfrentamos aquí, quedará para futuras investigaciones. Nuestra presentación será, por tanto, informal pero esperamos que no por ello menos rigurosa. Concluiremos señalando que la existencia de distintas teorías científicas, pertenecientes a distintos mundos y compatibles con la práctica efectiva de la ciencia, implica que todas ellas tienen el mismo estatus epistémico y que cada una constituye su propia ontología, sin que la coexistencia de diferentes ontologías implique prioridades ni privilegios metafísicos.

2. La teoría electrónica de Lewis

La noción de enlace es uno de los conceptos centrales en la química contemporánea¹. Un *enlace químico* es una unión entre átomos donde la disposición resultante de los núcleos y los electrones tiene una energía menor que la energía total de los átomos separados. Si la menor energía se logra mediante la transferencia completa de uno o más electrones de un átomo al otro, se forman iones, y el compuesto permanecerá unido mediante las atracciones electrostáticas entre los mismos. En este caso hablamos de un *enlace iónico*. El clásico ejemplo es la unión entre los átomos de sodio

* UNQ - CONICET, mglabarca@unq.edu.ar

** UNTREF - UBA, mariano_lastiri@yahoo.com.ar

y cloro. Ahora bien, si la menor energía se logra compartiendo electrones, los átomos se unen mediante un *enlace covalente* y se forman moléculas individuales. El caso más sencillo es la unión entre átomos de hidrógeno. Y un tercer tipo de enlace es el *enlace metálico* donde un gran número de cationes se mantienen unidos por un mar de electrones que circulan entre ellos.

Las teorías actuales sobre los enlaces químicos surgen a partir de los trabajos de Irving Langmuir, Walther Kossel y, muy especialmente, de Gilbert Newton Lewis (1916, 1923) Con una notable intuición, Lewis desarrolló su teoría muchos años antes del surgimiento de la mecánica cuántica y del concepto de orbital. En 1916 Lewis publicó un artículo, *The Atom and the Molecule*, que permitió comprender la naturaleza de los enlaces entre átomos no metálicos. El artículo sentó las bases de nuestra comprensión actual de otro concepto fundamental de la química: la estructura molecular. Postula allí que un enlace covalente es un par de electrones compartidos entre dos átomos, y escribió la fórmula para compuestos iónicos como $[\text{Na}]^+[\text{Cl}]^-$ (cloruro de sodio) y H_2 (molécula de hidrógeno) para compuestos covalentes. Los átomos pueden compartir más de un par de electrones y formar, de esta manera, enlaces dobles o triples. El orden de enlace es el número de enlaces que une a un par de átomos en particular.

Lewis señaló que cuando se forma un enlace covalente, los átomos comparten electrones hasta alcanzar la configuración electrónica del gas noble más cercano en la tabla periódica. Esta es la denominada regla del octeto: en la formación de enlaces covalentes, los átomos tratan de completar sus octetos compartiendo pares de electrones, dos para el caso del hidrógeno que alcanza la configuración electrónica del helio, ocho para los restantes elementos. La regla del octeto explica la valencia de los elementos y las estructuras de muchos compuestos. Pero existen excepciones tanto a esta regla como a que el enlace consiste en un par de electrones, algunas ya conocidas por el propio Lewis, que dieron lugar a modificaciones en la versión actual de esta teoría.

Por otra parte, algunas moléculas tienen estructuras que no pueden expresarse mediante un simple diagrama de Lewis. Un ejemplo es el benceno para el que pueden escribirse dos estructuras de Lewis diferentes alternando la ubicación del enlace doble y el enlace simple en la molécula. Si sólo una de estas estructuras fuese correcta deberían esperarse diferencias en la longitud del enlace doble respecto de los enlaces simples. Sin embargo, los experimentos muestran que la longitud de los enlaces es la misma. De esta forma, resulta mejor considerar la estructura de Lewis del benceno como una combinación de las dos estructuras posibles, con cada enlace teniendo propiedades intermedias entre uno simple y uno doble. Esta combinación de estructuras se denomina resonancia. En este tipo de estructuras los electrones que no tienen una única ubicación se encuentran deslocalizados sobre los seis átomos de carbono.

Con el surgimiento de las teorías modernas o mecánico cuánticas del enlace a fines de la década de 1920 —la teoría del enlace de valencia y la teoría de los orbitales moleculares— se

superaron algunas limitaciones que presentaba la teoría de Lewis. Sin embargo, se la continúa utilizando para escribir las estructuras de una sustancia permitiendo predecir la presencia de pares solitarios de electrones y las formas moleculares.

3. La teoría de los orbitales moleculares

La teoría de los orbitales moleculares (OM) fue introducida por el premio Nobel Robert Mulliken (1928) y Friedrich Hund, con importantes contribuciones de Sir John Lennard-Jones (1929), Erich Hückel y Charles Coulson. Esta teoría surge como una alternativa superadora de los límites que presentaban la teoría electrónica de Lewis y la teoría de repulsión de los pares de electrones de valencia (VSEPR), y era más fácil de utilizar en los cálculos que la teoría del enlace de valencia (EV). En particular, la teoría OM puede explicar la existencia de compuestos deficientes en electrones (por ej. el diborano), la estabilidad de la especie H_2^+ y el paramagnetismo del oxígeno.

En esta teoría los electrones ya no se encuentran localizados sobre los átomos o entre pares de átomos, sino deslocalizados en toda la molécula ocupando orbitales denominados orbitales moleculares. Es decir, los electrones ya no están confinados a enlaces individuales, sino que la teoría asigna electrones a la totalidad de la molécula. De este modo, el enlace covalente es descripto ahora en términos de orbitales moleculares distribuidos en toda la molécula.

En el ión molecular de hidrógeno H_2^+ , la molécula más sencilla existente, la función de onda se expresa de la siguiente forma:

$$\Psi(OM) = \Psi A1s + \Psi B1s$$

donde $\Psi A1s$ representa un orbital $1s$ centrado sobre un átomo A y $\Psi B1s$ es un orbital $1s$ centrado sobre un átomo B. El orbital molecular Ψ se denomina combinación lineal de orbitales atómicos (CLOA). Cualquier orbital molecular formado a partir de una combinación lineal de orbitales atómicos se denomina CLOA-OM.

Una combinación de orbitales atómicos que produce una disminución global de energía se denomina orbital enlazante σ . Y cuando dicha combinación produce un ascenso global de energía se llama orbital antienlazante σ^* . El orbital molecular formado tiene menor energía que los orbitales atómicos. La estabilidad de la molécula de hidrógeno se explica dado que su energía es menor que la de los átomos separados. Otro tipo de orbital aparece en una molécula poliatómica como el H_2O . En esta molécula, cuando un orbital está ocupado y no contribuye al orbital enlazante ni al antienlazante, se denomina *orbital no enlazante*. En algunos casos, este tipo de orbital es sólo un orbital atómico, en otros, consiste de una combinación lineal de orbitales atómicos sobre átomos que no son vecinos y, por tanto, se superponen en una extensión despreciable.

La descripción que hace la teoría OM de otra molécula poliatómica como el benceno C_6H_6 elimina la resonancia en su esquema explicativo y, por otro, mezcla conceptos propios de la teoría OM junto con conceptos de la teoría EV. En efecto, en la descripción de los enlaces σ de dicha molécula los químicos suelen emplear nociones como hibridación y solapamiento de orbitales, centrales en el esquema conceptual de la teoría EV. En el caso de los enlaces Π , característicos de los enlaces dobles, se encuentran deslocalizados alrededor del anillo de seis carbonos. Para representar este enlace Π deslocalizado a menudo suele escribirse el símbolo del benceno como un hexágono con un círculo en su interior. Dado que los tres orbitales moleculares enlazantes de tipo Π se extienden entre los seis átomos de carbono en lugar de estar concentrados entre pares de átomos de carbono, éstos orbitales se llaman orbitales moleculares deslocalizados. De esta forma, y como vemos, el marco conceptual de la teoría OM se emplea al describir los enlaces Π .

Otro concepto que forma parte de este marco conceptual es el de orden de enlace (OE) que expresa la fuerza de un enlace químico y que se define del siguiente modo:

$$OE = \frac{1}{2} (\text{número de electrones enlazantes} - \text{número de electrones antienlazantes})$$

A diferencia de la teoría de Lewis, en la teoría OM un par de electrones no es esencial para un enlace: un único electrón puede mantener dos átomos unidos con cerca de la mitad de la fuerza de un par de electrones (H_2^+), pero dicho par de electrones es el máximo permitido para ocupar un orbital molecular, de acuerdo al principio de exclusión de Pauli.

4. Dos teorías para representar el enlace químico

Hasta aquí hemos reseñado los aspectos centrales de las dos teorías en la descripción del enlace covalente. Analizaremos ahora las profundas diferencias conceptuales entre estas formulaciones teóricas.

En líneas generales, a la teoría de Lewis le interesa explicar la forma en que se distribuyen los electrones en una molécula de forma que esta distribución pueda dar cuenta de las propiedades conocidas de las sustancias químicas. Tales propiedades, por otra parte, se determinan por métodos físicos como la difracción de rayos X o la espectroscopía de microondas. El dominio de aplicaciones está restringido a moléculas cuyos constituyentes son, en su mayor parte, átomos del segundo y tercer período de la tabla periódica. Las propiedades de los átomos son introducidas en la teoría de Lewis 'desde afuera': la información relevante para construir una estructura de Lewis, el número de electrones del último nivel de energía de un átomo neutro, proviene de los modelos atómicos construidos con ayuda de la mecánica cuántica.

Por su parte, la teoría OM se basa en el aparato conceptual y formal de la mecánica cuántica y trata a las moléculas como sistemas cuánticos de muchas partículas y a los orbitales moleculares

que explican los enlaces como combinaciones lineales de orbitales atómicos. Los procedimientos recién mencionados relativos a la forma de determinar las propiedades de las moléculas se aplican también en estos casos. Estos procedimientos comunes permiten establecer la relación entre las aplicaciones de una y otra teoría. En principio, las aplicaciones de la teoría OM son, al menos, tan amplias como las de la teoría de Lewis. Por otra parte, las deficiencias de la teoría de Lewis mencionadas en la sección 3 son resueltas por la teoría OM que tiene, de este modo, un rango de aplicaciones mayor.

En un análisis más específico, la primera diferencia importante a resaltar yace en la descripción del enlace covalente. Mientras que en el esquema conceptual de Lewis se explica a través de un par de electrones compartidos, en el esquema conceptual de la OM es posible prescindir de dicho par de electrones: como señalamos, en la molécula más sencilla existente, el ión molecular de hidrógeno H_2^+ , un único electrón puede mantener los dos átomos unidos. En particular, la teoría OM apela a la noción de orbital en su esquema explicativo, noción que se encuentra ausente en las estructuras de Lewis. De este modo, mientras que en la teoría de Lewis los electrones se encuentran localizados en enlaces individuales (excepto en aquellas moléculas que presentan formas resonantes), en la teoría OM, por el contrario, los electrones están deslocalizados en orbitales moleculares por toda la molécula.

Un aspecto relevante a señalar es la aceptación de dichas teorías en las comunidades científicas. Pese a ser la primera teoría que describía adecuadamente un enlace en sustancias no iónicas y al posterior surgimiento de la mecánica cuántica, las estructuras de Lewis son aún ampliamente utilizadas desempeñando un papel esencial tanto en los cursos introductorios de química general como de química orgánica. La teoría se utiliza en la descripción de aspectos semicuantitativos del enlace químico y de la estructura molecular (para mayores detalles, véase Reed, 1994), mientras que, por su parte, la teoría OM se utiliza para describir aspectos cualitativos (por ej. determinación del paramagnetismo de una molécula) como cuantitativos (las energías de los orbitales moleculares). Asimismo, una descripción bidimensional del enlace y de la estructura de la molécula es brindada por Lewis, mientras que la teoría OM brinda una representación tridimensional. Al igual que la teoría electrónica de Lewis, la teoría OM es ampliamente utilizada en las comunidades física y química, pese a que la otra teoría mecánica cuántica empleada para describir un enlace—la teoría EV—comenzó a resurgir desde la década de 1980 tornándose en una atractiva alternativa a la teoría OM (Hiberty y Shaik, 2007). En consecuencia, la teoría de Lewis y la teoría OM juegan papeles complementarios en la descripción del enlace covalente y su utilización dependerá de los factores considerados relevantes para un determinado propósito: la necesidad de cálculos de tipo cuantitativo, la facilidad de uso en la enseñanza, la facilidad en la visualización, etc. A idénticas conclusiones se arriba cuando se analizan en profundidad y se comparan, empleando la noción

de modelo como mediador entre teoría y realidad, las dos teorías mecánico cuánticas existentes para describir el enlace químico. la teoría OM y la teoría EV (Lombardi, Labarca y Adúriz-Bravo, 2010).

Este análisis muestra que las dos teorías reseñadas constituyen sus ontologías de manera diferente de modo que no pueden identificarse una con otra. Desde la perspectiva de un pluralismo ontológico de raigambre kantiana tales ontologías son igualmente “reales”, sin relaciones de prioridad ni dependencia entre ellas. Dado que en este marco conceptual toda ontología surge de la síntesis entre realidad nouménica y esquema conceptual, el dominio ontológico de la química resulta tan constituido como el dominio ontológico de la cuántica y, por tanto, no cuenta con privilegio alguno. De esta manera, el mundo de la química preserva su autonomía ontológica puesto que las entidades químicas no necesitan de las entidades cuánticas para legitimar su existencia (Lombardi y Labarca, 2005 y 2008).

Finalmente, creemos que este análisis filosófico es la herramienta conceptual necesaria para resolver el problema pedagógico que plantean, desde hace tiempo, algunos educadores en química: la existencia de cuatro teorías diferentes —dos químicas y dos mecánico-cuánticas— para explicar el mismo fenómeno (Holtzclaw y Robinson, 1988, Hurst, 2002).

5. Conclusiones

Como señalamos al inicio, este trabajo intenta discutir algunos aspectos centrales del problema general de las relaciones interteóricas en la ciencia. En particular, nos hemos ocupado de las relaciones entre una teoría química y una teoría física (mecánico cuántica). El problema de si la química puede ser o no reducida a la física ha sido extensamente discutido en el ámbito de la filosofía de la química (*cf.* Lombardi y Labarca, 2005). Nuestro aporte apela a la estrategia más parsimoniosa de ver este problema considerando pares de teorías particulares. Si bien nuestro análisis aún debe ser profundizado, creemos haber mostrado que en el caso particular reconstruido aquí no puede hablarse de una reducción de la teoría de Lewis a la teoría OM. De aquí, concluimos que una perspectiva más adecuada para analizar el problema de la ontología de las teorías científicas es la de un enfoque pluralista. En nuestro caso particular, encontramos conveniente resaltar las distintas “naturalezas” del enlace químico, dada su distinta concepción en el esquema conceptual de la química y de la mecánica cuántica.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo brindado por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica, la Universidad Nacional de Quilmes y la Universidad de Buenos Aires.

Notas

1 Para un desarrollo histórico del concepto, véase Sutcliffe, 1996.

2 Algunos compuestos tienen un número impar de electrones, mientras que los átomos de fósforo, azufre, cloro u otro no metal del período 3 y posteriores pueden acomodar más de ocho electrones en su capa de valencia.

Referencias

- Hiberty, P. C. y Shaik, S. (2007). "A Survey of Recent Developments in *Ab Initio* Valence Bond Theory", *Journal of Computational Chemistry* 28: 137-151
- Holtzclaw, H. F. y Robinson, W. R. (1988) *General Chemistry*, D.C. Heath: Lexington, MA
- Hurst, M. (2002) "How We Teach Molecular Structure to Freshmen", *Journal of Chemical Education* 79: 763-764.
- Labarca, M. y Lasturi, M. (2006) "Estructuralismo e Internalismo. Hacia un Pluralismo Ontológico y Epistemológico", en J. Ahumada, M. Pantalone y V. Rodríguez (eds.), *Epistemología e Historia de la Ciencia, Selección de Trabajos de las XVI Jornadas*, Volumen 12, pp. 307-313.
- Lennard-Jones, J. E. (1929) "The Electronic Structure of Some Diatomic Molecules", *Trans. Faraday Soc.* 25: 668-686
- Lewis, G. N. (1916) "The Atom and the Molecule", *Journal of the American Chemical Society* 38: 762-785.
- Lewis, G. N. (1923) *Valence and the Structure of Atoms and Molecules*. Chemical Catalog Company: New York.
- Lombardi, O. y Labarca, M. (2005). "The Ontological Autonomy of the Chemical World", *Foundations of Chemistry* 7: 125-148
- Lombardi, O. y Labarca, M. (2008) "The End of the Dream of Unity", *Current Science* 94: 438-439.
- Lombardi, O., Labarca, M. y Adúriz-Bravo, A. (2010) "Modelos como Mediadores: El caso del Enlace Químico", en Merino, C., Adúriz-Bravo, A. y Arellano, M. (eds.) *Avances en Didáctica de la Química: Modelos y Lenguajes*, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso.
- Mulliken, R. S. (1928) "The Assignment of Quantum Numbers for Electrons in Molecules", *Physical Review* 32: 186-222.
- Reed, J. L. (1994). "The Lewis Structure. An Expanded Perspective", *Journal of Chemical Education* 71: 98-100.
- Sutcliffe, B. T. (1996), "The Development of the Idea of a Chemical Bond", *International Journal of Quantum Chemistry* 58: 645-655.