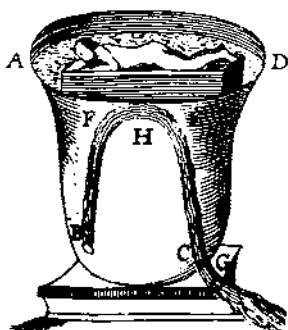


INTERCAMBIOS, COMENTARIOS



Y CRÍTICAS

En esta sección intentamos recoger, por una parte, los comentarios y críticas sobre los trabajos aparecidos, así como sugerencias de cualquier tipo que puedan contribuir a una mejora de la revista.

En segundo lugar pretendemos que estas páginas sirvan para dar a conocer la existencia de grupos de trabajo y facilitar así los contactos e intercambios.

También pensamos que puede ser de interés el conocimiento de las líneas de trabajo seguidas por los distintos grupos, que pueden enviar breves resúmenes de sus actividades.

Por último contemplamos la posibilidad de favorecer los intercambios objeto de esta sección con la publicación de algunas entrevistas y mesas redondas.

DEBATES

DENSIDAD ELECTRÓNICA MOLECULAR

*E. Pérez Romero, L.M. Tel Alberdi.
Departamento de Química Física, Universidad de Salamanca.*

Introducción

En la descripción de las estructuras moleculares, que se suelen encontrar en los textos básicos de Química, se hace uso repetidamente de conceptos abstractos como el de orbital. Incluso es habitual encontrar adjetivos para especificar la naturaleza o forma de los orbitales. Así encontramos denominaciones como orbital atómico, molecular, híbrido, hidrogenoide, de Slater, gaussiano, canónico, localizado, enlazante, antienlazante, simétrico, de valencia, y otras muchas sin olvidar los orbitales s, p, d, f, σ , π , δ ...

El conjunto constituye todo un universo de orbitales. En muchas ocasiones estos

orbitales son presentados como si se tratara de pequeños ganchos o anzuelos, presentes en los átomos y responsables del establecimiento de los enlaces químicos. Pero, en realidad, un orbital no es más que una función matemática, que, como tal, tiene una representación gráfica y una interpretación física. Tres conceptos que no deben en ningún caso ser confundidos.

En un reciente estudio (Solbes, Calatayud, Climent y Navarro 1987) acerca de las maneras en que estos conceptos son introducidos en los textos básicos de Química o Física, lamentablemente no se ha planteado la cuestión de la posible confusión entre el objeto orbital y su interpretación en términos de probabilidad de presencia del electrón que pretenden describir.

Basta hacer una somera revisión de los textos básicos para comprobar que los orbitales han sido representados de todas las maneras imaginables, pasando por las hermosas "florecillas" o por las "orejas

de conejo", hasta las representaciones de los orbitales atómicos tipo f. Este interés por las descripciones y representaciones detalladas de los orbitales se pone de manifiesto una vez más cuando se hace uso de los métodos informáticos para la enseñanza de la Química. En todos los proyectos aparece, como uno de los primeros objetivos, la representación gráfica de las funciones orbitales.

Un orbital es una pieza básica en un modelo teórico tomado de la Mecánica Cuántica y es, en el contexto de esa teoría, donde tiene sentido. Aisladamente y fuera de contexto sirve para muy poco. Un orbital interviene en la descripción de la distribución electrónica de un átomo o de una molécula poliatómica a través de su inclusión en un producto antisimetrizado, sea ésta una configuración electrónica o una forma resonante del método de "enlaces de valencia".

Contrasta con todo lo anterior el escaso interés o atención prestados a una cantidad física, que contiene importante in-

formación química acerca de las moléculas, y que es susceptible de determinación experimental. Nos referimos a la *densidad de carga eléctrica*.

Densidad electrónica molecular

En una descripción simplista, puede decirse que una molécula está constituida por un conjunto de cargas puntuales positivas, los núcleos, sumergidas en un continuo de carga eléctrica negativa, los electrones, de manera que globalmente resulte neutro desde el punto de vista eléctrico y estable desde el energético.

La distribución de los electrones, al tratarse de un continuo, está descrita por una función densidad o número de electrones por unidad de volumen, distinta en cada punto del espacio. La densidad de carga electrónica y la densidad de partículas están relacionadas entre sí por la carga elemental del electrón.

Esta imagen de una molécula como un continuo de carga electrónica, en modo alguno, debe ser vista como estática, pues sería inestable, sino como media estadística, dada por la probabilidad por unidad de volumen de que se encuentre alguno de los electrones en cada punto del espacio. Las medidas experimentales determinan estos valores medios y, en consecuencia, podemos hablar de una densidad de carga, como una función de las tres coordenadas espaciales.

Los orbitales no son cantidades físicas que se puedan medir experimentalmente, como tampoco lo son las funciones de onda. La confirmación de la bondad de un modelo teórico para describir una molécula debe necesariamente pasar por un cálculo de una cantidad física, sea una energía, un momento angular, un momento dipolar eléctrico, u otra que se pueda medir experimentalmente. Todo ello pasa por la determinación mediante el modelo teórico de la densidad de carga electrónica.

La distribución electrónica, correspondiente a un estado estacionario, se describe teóricamente mediante una función de onda que depende de las variables de todos los electrones presentes. La función densidad electrónica, en cambio, depende de las tres coordenadas de un solo electrón, como un orbital. Pero, a diferencia de este último, *representa la probabilidad por unidad de volumen de que, en cada punto del espacio, pueda hallarse alguno de los electrones, independientemente de donde puedan encontrarse los demás.*

Por tanto, la densidad electrónica representa una suma continua de todas las densidades de probabilidad de presencia de todos los electrones salvo uno de

ellos. (Prescindimos de especificar *spines* electrónicos).

$$\rho(x, y, z) = N \int |\psi(r_1, r_2, \dots, r_N)|^2 dr_1, dr_2, dr_N$$

donde N es el número de electrones presentes en el átomo o molécula. De esta forma esta función densidad está relacionada con la función de onda electrónica, que, según los casos, puede ser mejor o peor conocida dependiendo de las distintas aproximaciones de la Química Teórica⁽¹⁾.

Por otro lado, la distribución de la densidad de carga electrónica puede ser determinada experimentalmente. En efecto, los estudios por difracción de rayos X en los cristales determinan precisamente esta densidad de carga negativa, y localizan la posición de los núcleos como la de aquellos atractores que son capaces de concentrar en su entorno una alta densidad de electrones. Es así como se han determinado la mayor parte de las distancias internucleares en los cristales.

Por tanto, *la densidad de carga es justamente el punto de unión o puente, entre un modelo teórico, que utiliza los orbitales como sus piezas básicas, y las determinaciones experimentales de cantidades físicas medibles.* A pesar de ello, es muy escasa la atención que se presta a esta cantidad física en los textos básicos y mucha la importancia que se otorga a los propios orbitales.

Propiedades e interpretaciones de la densidad electrónica

Analicemos brevemente las características de la densidad electrónica y su capacidad predictiva del comportamiento de las especies químicas. Decíamos más arriba que, además de las cargas puntuales de los núcleos, la molécula presenta una distribución continua de carga negativa (Bader y Bedall 1973), representada por una función densidad estadística de electrones.

Se trata de una función escalar de las tres coordenadas espaciales $\rho(x, y, z)$. Es decir, a cada punto del espacio podemos asociar un escalar que expresa el número de electrones por unidad de volumen presentes en ese punto. Toma, por tanto, valores positivos en todos los puntos. No tendría sentido hablar de un número negativo de partículas. Se trata de una función continua. La única posibilidad de discontinuidad aparece en aquellos puntos notables que coinciden con las posiciones de los núcleos.

Indudablemente, la suma, integración por ser continua, extendida a todo el espacio debe dar como resultado el número total de electrones presentes en la molécula.

$$\int \rho dV = N \int \rho(x, y, z) dx dy dz = N$$

La función densidad electrónica se anula asintóticamente a distancia infinita de los núcleos. Se extiende hasta el infinito, aún cuando los valores son prácticamente despreciables a unos pocos nanómetros del núcleo más próximo.

Por tratarse de una función de tres variables, la pendiente, la derivada primera, en cada punto es un vector, el vector gradiente:

$$\nabla \rho = \left(\frac{\delta \rho}{\delta x}, \frac{\delta \rho}{\delta y}, \frac{\delta \rho}{\delta z} \right)$$

El gradiente toma un valor único en cada punto del espacio. Las direcciones de los gradientes (Bader, Anderson y Duke, 1979) están indicadas por una línea construida de manera que el gradiente en cada punto sea tangencial a la curva². Por cada punto del espacio pasa una sola curva de esas.

El vector gradiente se anula en los puntos singulares: máximos, mínimos y "puntos en silla". Estos últimos no tienen equivalentes en funciones de una sola variable y corresponden a los llamados puntos en "silla de montar", de "paso de montañas" a través de un puerto o de un collado.

La distinción entre máximos, mínimos o puntos en silla se hace a través de las derivadas segundas, que, al ser una función de tres variables, constituyen la matriz de Hess, o hessiana.

$$\begin{bmatrix} \frac{\delta^2 \rho}{\delta x^2} & \frac{\delta^2 \rho}{\delta x \delta y} & \frac{\delta^2 \rho}{\delta x \delta z} \\ \frac{\delta^2 \rho}{\delta y \delta x} & \frac{\delta^2 \rho}{\delta y^2} & \frac{\delta^2 \rho}{\delta y \delta z} \\ \frac{\delta^2 \rho}{\delta z \delta x} & \frac{\delta^2 \rho}{\delta z \delta y} & \frac{\delta^2 \rho}{\delta z^2} \end{bmatrix}$$

En los mínimos, la matriz hessiana es definida positiva y las tres curvaturas principales son positivas; en los máximos las tres curvaturas son negativas. Por último, en los "puntos en silla" las curvaturas, valores propios de la matriz hessiana, son unos positivos y otros negativos.

La función densidad electrónica presenta máximos en los puntos del espacio en los que se encuentran los núcleos. Pero son máximos agudos, en forma de pico, sin que en tales puntos sea posible el cálculo de las primeras derivadas, esto es, del gradiente. La imagen más próxima la tenemos en la topografía de la Tierra que representa una función de dos variables, no de tres. La representación de la función densidad electrónica sería similar a una cordillera, con sus picos coincidiendo con las posiciones de los núcleos.

Los mínimos de la función densidad electrónica aparecen a distancia infinita de los núcleos, donde se hace asintóticamente nula. Pero también hay un mínimo de la densidad electrónica en un punto en el interior de todas las estructuras moleculares en forma de jaula. Estas jaulas aparecen, entre otros, en los compuestos denominados "biciclo" por la Química Orgánica y en las micelas que estudia la Química Macromolecular. En estas moléculas, la densidad electrónica crece al desplazarnos desde esos mínimos, situados en el interior de la jaula, en cualquier dirección del espacio.

Otros puntos notables de la función densidad electrónica son los llamados "puntos en silla". En el interior del anillo de los compuestos cíclicos (aromáticos) hay un "punto en silla" que presenta dos curvaturas positivas y una negativa. La densidad electrónica crece, es un mínimo, al desplazarnos desde ese punto a otros situados en el mismo plano del anillo (bidimensional: dos curvaturas) y, en cambio disminuye al desplazarnos perpendicularmente al anillo (en esta dirección es un máximo).

Por último, en un punto intermedio de los enlaces aparece otro "punto en silla", pero en este caso tiene dos curvaturas negativas y una positiva. La densidad electrónica aumenta, es un mínimo, al desplazarnos a otros puntos situados a lo largo del enlace, mientras que disminuye, es un máximo, al desplazarnos en las dos direcciones transversas.

Como en toda cordillera, entre ciertos picos aparece una "cresta", mucho más fácilmente caracterizable en las representaciones gráficas del gradiente ("líneas de fuerza"). Matemáticamente "cresta" es la línea de los gradientes que presenta valores más altos que cualquier otra línea de gradientes infinitamente próxima (Runtz, Bader y Messer 1977). Estas "crestas" van desde un pico a otro pasando por un puerto de montaña (gradiente nulo y curvaturas de diversos signos). Pero en nuestras cordilleras no hay una cresta entre todos y cada una de las parejas de picos. Igual ocurre con la función densidad electrónica, con la peculiaridad de que sólo aparecen las "crestas" entre aquellas parejas de núcleos donde la Química suele escribir un trazo para indicar un enlace.

El número de "crestas" que parten de un mismo pico en la función densidad electrónica, un núcleo, representa el número de coordinación de ese átomo. Por ejemplo, en la molécula de H_2O aparece una cresta entre el oxígeno y uno cualquiera de los hidrógenos, pero no entre los dos átomos de hidrógeno. *De esta forma, la densidad electrónica reproduce los esquemas de las uniones químicas.*

Otra de las curiosidades que presenta la función densidad electrónica consiste en que, en moléculas derivadas del ciclopropano, las crestas que unen los átomos de carbono no van en línea recta de uno a otro, formando un triángulo equilátero, sino que aparecen curvadas hacia el exterior, justificando lo que en Química se ha dado en llamar "tensión de anillo", responsable de la inestabilidad o gran reactividad de este tipo de moléculas. La idea de enlaces curvos tiene su reflejo en la forma de las crestas que presenta la función densidad electrónica.

Aunque no fuera más que por estos detalles, merecería la pena una descripción más pormenorizada de estas funciones densidad electrónica en los textos básicos de Química. Pero las posibilidades interpretativas y predictivas no se han agotado. Cabe hacer, a nivel elemental, otros tipos de análisis.

Por ejemplo, se puede estudiar las modificaciones que tienen lugar en la densidad electrónica por razón de la formación de los enlaces químicos, hallando la diferencia entre las densidades electrónicas correspondientes a la molécula y a una superposición de átomos en las mismas posiciones, es decir, el análisis de la reestructuración de la carga eléctrica. La superposición de átomos, sin reorganizar la distribución de la carga electrónica, ha recibido el nombre de "promolécula".

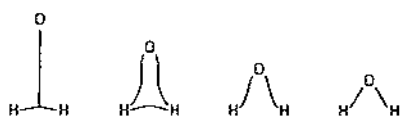
En esa diferencia puede apreciarse, entre otras cosas, si la formación del enlace se lleva a cabo por transferencia electrónica, si puede hablarse en un enlace iónico, o simplemente si la molécula es polar. Este es uno de los pocos aspectos relativos a la densidad electrónica en las moléculas, que suelen ser mencionados en los textos. Se afirma que la formación de los enlaces lleva aparejada una transferencia de densidad electrónica, densidad de la molécula menos la de la promolécula, desde las zonas periféricas moleculares hacia las regiones internucleares. Esta afirmación, si bien es cierta en moléculas como H_2+ y H_2- , es más que discutible en moléculas más complejas.

Otra de las posibles vías de análisis de las relaciones entre la función densidad electrónica y la formación de los enlaces químicos consiste en el estudio de la deformación que sufre esa función densidad de carga electrónica cuando los átomos se aproximan o se alejan.

El proceso $A + BC \rightarrow AB + C$, por aproximación colineal del átomo A a la molécula BC, simultáneamente a un alargamiento de la unión BC, presenta en todo momento las dos crestas asociadas a las uniones AB y BC, que se hacen más marcadas o más difusas a medida que unos átomos se acercan o se alejan, sin

que deje de poderse hablar de enlace, salvo a la distancia infinita.

Por el contrario, (Bader, Nguyen-Dang y Tal 1979) la aproximación de un átomo de oxígeno a la molécula de H_2 , en dirección transversa, correspondiente a la reacción $H_2 + O \rightarrow H_2O$, se inicia deformando la densidad electrónica en H_2 y curvando, hacia el átomo que se aproxima, la cresta que aparece asociada al enlace. Al aproximarse más el átomo de oxígeno llega un momento en que aparece una nueva cresta entre este átomo de oxígeno y el punto medio del enlace H-H.



En este momento puede hablarse de un enlace entre tres centros atómicos. La subsiguiente aproximación del átomo de oxígeno hace desaparecer la cresta de la función densidad electrónica entre los átomos de hidrógeno en favor de dos nuevas crestas entre el oxígeno y cada uno de los átomos de hidrógeno, formando de esta forma la molécula de agua.

El proceso descrito en el párrafo anterior es susceptible de visualización en una pantalla de un equipo informático, haciendo uso de las técnicas de animación.

Conclusión

La función densidad electrónica presenta una enorme capacidad predictiva o interpretativa, de las propiedades y estructuras moleculares. En la breve exposición precedente no hemos entrado a discutir la posibilidad de descomponer dicha densidad en suma de términos asociados a cada uno de los átomos presentes (Hirshfeld 1977, 1985; Rychlewsky y Parr 1986; Li y Parr 1986) ni la forma en que dicha descomposición es transferible de unas moléculas a otras con el mismo grupo funcional, ni cómo dicha descomposición puede predecir propiedades moleculares en forma de una suma extendida a los fragmentos, ni la posibilidad de indentificar algunos de los fragmentos con los centros más electropositivos (Maslen y Spackman 1985), etc. Son todos ellos conceptos relacionados con la densidad de carga, que aparecen mencionados en los textos básicos de Química.

A pesar de todo ello, la función densidad electrónica de las moléculas, tan próxima a las determinaciones experimentales independientemente de su más o

menos preciso tratamiento teórico, parece ser la gran olvidada, en favor de una detalladísima descripción de las funciones orbitales que pretenden justificarla.

Referencias bibliográficas

Bader, R.F.W., Bedall, P.M., 1973. *Virial Partitioning of Charge Distributions and Properties of Diatomic Hydrides*, *J. Am. Chem. Soc.* 95, pp. 305-315.

Bader, R.F.W., Anderson, S.G., Duke, A.J., 1979. *Quantum Topology of Molecular Charge Distributions. I.*, *J. Am. Chem. Soc.* 101, pp.1389-1395.

Bader, R.F.W., Nguyen-Dang, T.T., Tal, Y., 1979. *Quantum Topology of Molecular Charge Distributions. II. Molecular Structure and its Change*, *J. Chem., Phys.* 70, pp. 4316-4329.

Hirshfeld, F.L., 1977. *Bonded-Atom Fragments for Describing Molecular Charge Densities*, *Theoret. Chim. Acta (Berl.)* 44, pp. 129-138.

Hirshfeld, F.L., 1985. *Accurate Electron Densities in Molecules*, *J. Molec. Struct.* 130, pp. 125-141.

Li, L., Parr, R.G., 1986. *The Atom in a Molecule: A Density Matrix Approach*, *J. Chem. Phys.* 84, pp. 1704-1711., 85, pp. 3133-313.

Maslen, E.N., Spackman, N.A., 1985. *Atomic Charges and Electron Density Partitioning*, *Aust. J. Phys.* 38, pp. 273-287.

Runtz, G.R., Bader, R.F.W., Messer, R.R., 1977. *Definition of bond paths and bond directions in terms of molecular charge distributions.*, *Can J. Chem.* 55, pp. 3040-3045.

Ryschlewsky, J., Parr, R.G., 1986. *The Atom in a Molecule: A Wave Function Approach*, *J. Chem. Phys.* 84, pp. 1696-1703.

Solbes, J., Calatayud, M., Climent, J. y Navarro, J., 1987. *Errores conceptuales en los modelos atómicos cuánticos*, *Enseñanza de las Ciencias*, 5, pp. 189-195.

Notas

1 En el trabajo (Solbes, Calatayud, Climent y Navarro 1987) mencionado un poco más arriba parece admitido, sin entrar en mayores discusiones, que los textos hacen una clara distinción entre una función que describe un conjunto de electrones en un átomo o molécula polieletrónica, y que por tanto depende de las coordenadas de todos los electrones que está tratando, y una función orbital que sólo es capaz de describir a uno, y en conse-

cuencia depende sólo de tres variables coordenadas espaciales. La distinción entre los planteamientos de problemas de un electrón o de varios electrones parece ser uno de los escollos más difícilmente superables, incluso por los estudiantes universitarios.

2. La representación de una función de varias variables mediante curvas de nivel, o mejor, de superficies equipotenciales, suele ser práctica habitual cuando la función escalar es el potencial electrostático creado por un sistema de cargas puntuales. A veces se prefiere discutir las peculiaridades de esa función mediante sus gradientes, campo eléctrico, representando las direcciones del gradiente mediante "líneas de fuerza". En cada punto, la línea de fuerza es perpendicular a la superficie equipotencial.

La única diferencia con lo que aquí estamos exponiendo es que la función escalar no es el potencial electrostático, sino la densidad continua de carga eléctrica.

EN TORNO A LOS ORBITALES ATÓMICOS

*J. Solbes y J. Navarro
Programa de Innovació Educativa i
Reforma. Generalitat Valenciana.*

Departament de Física Atòmica, Molecular i Nuclear. Universitat de València

Los Editores de la Revista nos han remitido el trabajo "Densidad electrónica molecular", de E. Pérez y L.M. Tel, pidiendo nuestra participación en un debate sobre estos conceptos de estructura atómica y molecular. La idea del debate nos parece muy buena y agradecemos a los Editores su invitación. Entendemos que el interés del debate consiste en intentar aportar nuevos elementos de reflexión y de discusión sobre las dificultades que plantea la enseñanza-aprendizaje de los conceptos abstractos relacionados con la estructura atómica, dificultades ya señaladas en diversos trabajos recientes (Ducasse et al. 1985; Solbes et al. 1987a, 1987b; Dumond y Merlin 1988). Por ello, creemos que sería bastante estéril una discusión sobre *si lo que dicen que dije es o no lo que digo*. La discusión que inicialmente pensábamos proponer estaba centrada en torno al título *Orbital atómico vs. densidad electrónica*, pero a medida que escribíamos iban aflorando cuestiones que desde hace tiempo venimos discutiendo con compañeros del Seminario de Física y Química o del grupo

de Reforma de las Enseñanzas Medias sobre la introducción de conceptos de física cuántica. Por ello, antes de abordar el concepto de orbital, haremos algunas consideraciones más generales, con la esperanza de que esto pueda dar pie a un debate más amplio.

Coincidimos con E. Pérez y L.M. Tel en recomendar una descripción más detallada de la densidad electrónica, basada en sus determinaciones experimentales (Solbes et al. 1987b). A nuestro juicio, esto podría hacerse en el último curso de la enseñanza secundaria y en el primer curso universitario, aunque naturalmente, con un tratamiento cualitativo (sin referencias a gradientes, hessianos, etc.) y visual (utilizando representaciones gráficas, como los diagramas de contorno). Sin embargo, no creemos que la introducción de las densidades electrónicas se deba realizar de modo puramente empírico, al margen de los conceptos proporcionados por la física cuántica. Dicha introducción debe hacerse en relación con la función de ondas electrónicas o, más adecuadamente en estos niveles de enseñanza, con su aproximación en términos de orbitales.

Si queremos que la enseñanza de las ciencias proporcione una visión más correcta del trabajo científico es necesario, como señalan diversos autores (Gil 1983, Hodson 1985, Millar y Driver 1987), la superación del empirismo, que supone que los conocimientos científicos se forman por inducción a partir de los datos. De hecho, toda investigación científica, en el momento de realizarse, se inserta en el marco conceptual o paradigma existente, como ponen de manifiesto las referencias bibliográficas, el planteamiento inicial de los problemas o la fundamentación de las hipótesis. Esto supone, evidentemente, un rechazo de los "puros datos" como punto de partida de los conocimientos científicos, porque dichos datos han de formularse en términos de teorías y deben obtenerse con ayuda de instrumentos diseñados y leídos en el marco de las mismas.

Antes de plantear nuestra propuesta, conviene analizar brevemente cómo se introducen en el enseñanza secundaria y en el primer curso universitario estos conceptos relacionados con la estructura atómica. De forma esquemática, podemos decir que se siguen tres caminos: a) usar datos y modelos empíricos, basados fundamentalmente en conceptos clásicos; b) realizar una mezcla y/o yuxtaposición de modelos clásicos, precuánticos y cuánticos sin distinguir los conceptos clásicos de los cuánticos; c) utilizar conceptos cuánticos, de forma cualitativa por las dificultades didácticas que plantean en estos niveles, mostrando las ventajas y limitaciones de los modelos clásicos, precuánticos o cuánticos.

El análisis de los textos (Solbes et al. 1987a, 1987b) y diversos cuestionarios aplicados a profesores (Gil et al. 1986), indican una marcada preferencia por la vía b). Esto conlleva, en nuestra opinión, una serie de inconvenientes, entre los que destacamos la existencia de ciertos errores conceptuales o la ausencia de una visión unitaria de la estructura atómica y molecular. Como ejemplo del primer tipo de inconvenientes, mencionaremos que las distribuciones de probabilidad electrónicas se interpretan como "nubes de carga" (obtenidas por superposición de fotografías) o como electrones "difuminados". Señalemos, incidentalmente, que a partir de las densidades de carga empíricas, sin la existencia de otros conceptos previos, difícilmente se puede llegar a una conclusión distinta de que los electrones "se difuminan" alrededor del átomo o de la molécula, pues las densidades son funciones continuas. Como ejemplo del otro tipo de inconveniente, señalemos que la mezcla de distintos modelos para los diferentes tipos de enlace a menudo oculta algo esencial: que todos ellos (metálico, covalente, etc), se deben a una única interacción, la electromagnética. Igualmente, esto origina una distinción entre modelo de enlaces y modelo de bandas que impide una visión unitaria de las sustancias en estado sólido.

¿Qué consecuencia tiene esto en los alumnos? Hemos encontrado (Gil et al. 1986, 1989) que, en primer lugar, no sólo perjudica la correcta comprensión de la física moderna, sino también de la clásica, al no quedar claros los límites de validez de esta última ni la diferencia entre ambos paradigmas. En segundo lugar, se proporciona una visión deformada sobre el desarrollo de la ciencia y, por tanto, de la propia metodología científica. Finalmente, los alumnos incurrir en la totalidad de los errores detectados en los textos, pero también en otros nuevos. Así, entre alumnos de secundaria, hemos detectado, por ejemplo, que la dualidad onda-córculo se considera sólo como una propiedad de la luz, pero no de los electrones; o bien, que en dicha dualidad, la onda se asocia al movimiento del cuerpo. Es muy significativa la persistencia de estos errores en estudiantes de 2º curso de la licenciatura en Física (Solbes et al. 1988).

Tanto el análisis de los textos, como los resultados obtenidos con los alumnos, nos conducen a la necesidad de introducir los conceptos cuánticos: a) teniendo en cuenta los conceptos y errores previos de los alumnos, y b) mostrando cómo una serie de problemas que no pudieron ser explicados por la física clásica originaron su crisis y el surgimiento de un nuevo paradigma. Creemos que puede realizarse una aproximación a la descripción cuántica del comportamiento de la

materia de modo puramente cualitativo y muy elemental, pero suficiente para poder referirse a sus aplicaciones en átomos y enlaces, por ejemplo. Por ello, defendemos el uso de modelos precuánticos en los niveles de enseñanza que correspondan, como el modelo de Bohr para el átomo de hidrógeno o la teoría electrónica de Lewis y Kossel para la valencia. Conviene tener presente que cualquier modelo permite representar de forma esquemática y sencilla lo que de otro modo requeriría una complicada descripción matemática. Pero si bien siempre se hacen ver las virtudes (los resultados) de un modelo, pocas veces se hace lo mismo con sus limitaciones. Por ejemplo, entre los méritos del modelo de Bohr cabe destacar su explicación de las leyes empíricas de la radiación emitida por un átomo de hidrógeno, o la caracterización del estado de un electrón mediante un número cuántico, que nos permite conocer luego valores de energías y radios, cuyas escalas han sido fijadas en términos de unas pocas constantes. Entre sus inconvenientes, hay que destacar el que esté basado en hipótesis *ad hoc*, y que mezcla una descripción clásica con hipótesis cuánticas (incompatibles con las clásicas). Así, introduce un concepto de órbita, muy intuitivo en un imagen clásica, pero que no puede tener realidad en esta misma imagen, ya que el electrón radiaría energía y colapsaría con el núcleo. Además, la propia idea de órbita carece de sentido en el contexto cuántico, puesto que no cabe hablar de trayectorias.

En lo que se refiere a los niveles superiores de enseñanza, se puede empezar con el efecto fotoeléctrico y los espectros discontinuos, para mostrar las dificultades clásicas e introducir las ideas cuánticas. Hay que mostrar que los fotones, electrones, etc., son objetos de nuevo tipo (llamados cuantones por algunos, aunque con poco éxito), que tienen un comportamiento nuevo. Éste requiere de un nuevo marco formal para describir sus propiedades, diferente de la ecuación de movimiento de las partículas clásicas o de la ecuación de propagación de las ondas clásicas. A este respecto, convendría meditar que no tiene nada de asombroso el que electrones y fotones no sean ni partículas ni ondas. Lo asombroso es, más bien, que sólo con estos dos conceptos, la física clásica haya sido capaz de explicar tan enorme variedad de fenómenos. En este nivel de enseñanza, no es preciso introducir (y creemos que hay que evitar hacerlo) la ecuación de Schrödinger para poder hablar cualitativamente de la función de ondas ψ . Un análisis del experimento de Young realizado con electrones (Feynman 1971), es suficiente para estos propósitos. Como es evidente, los alumnos han de haber estudiado previamente propagación e interfe-

rencias de ondas clásicas. En el análisis de este experimento, se puede dar también la interpretación de Born: $|\psi|^2 dr$ es la probabilidad de encontrar el electrón en un determinado volumen dr en torno al punto r .

Veamos ahora cómo abordar el concepto de orbital. Empezaremos por el átomo más sencillo, el de hidrógeno. Debido a la diferencia de masas entre el electrón y el núcleo, se puede tomar el centro de masas del sistema en la posición del núcleo y así, el movimiento relativo del sistema corresponde, aproximadamente, al movimiento del electrón en torno al núcleo. En esta aproximación, la función de ondas del sistema viene dada por la función de ondas del electrón en el campo electromagnético del núcleo. Por razones históricas, se suele llamar orbital a esta función de ondas del electrón (lo que tiene el inconveniente de seguir manteniendo, de algún modo, la idea de órbita). Aquí es donde volvemos al punto de partida: puesto que $|\psi|^2$ es la densidad de probabilidad de encontrar el electrón en un determinado punto, esta función coincidirá, salvo por un factor e , con la densidad de carga electrónica determinada experimentalmente. Estas densidades pueden visualizarse mediante diagramas de contorno o curvas de nivel, tal como explican E. Pérez y L.M. Tel en su trabajo, pudiéndose obtener las "florecillas" u "orejas de conejo" a que hacen referencia. Creemos conveniente pasar por estas representaciones, relativamente sencillas de visualizar en la pantalla de un ordenador, para deducir de ello lo que de otro modo resultaría difícil: las distintas densidades de probabilidad $|\psi|^2$ corresponden a otros tantos estados estacionarios del electrón, caracterizados por su función de ondas ψ , y esta función de ondas contiene toda la información que la física cuántica nos proporciona sobre el sistema. En particular, proporciona información sobre la distribución de probabilidad espacial y sobre las energías correspondientes a cada estado estacionario.

En el caso de átomos con más electrones, es preciso utilizar una aproximación adicional. Se puede seguir considerando que el centro de masas coinciden aproximadamente con la posición del núcleo, pero la función de ondas del sistema es la función de ondas de todos los electrones, lo que no puede obtenerse a menos que se hagan ciertas aproximaciones (aunque con los métodos de Montecarlo, se está empezando a obtener estas funciones numéricamente en casos con pocos electrones). Resulta bastante intuitivo entender que las repulsiones ejercidas sobre un electrón por los demás electrones se cancelarán grandemente por estar todos ellos distribuidos más o menos simétricamente en torno al núcleo, de tal forma

que la interacción dominante experimentada por un electrón será la ejercida por la carga del núcleo, aunque corregida (apantallada), en mayor o menor medida por los demás electrones. Esta es la llamada aproximación del campo medio: un electrón se mueve en el campo electromagnético de una carga puntual positiva (la del núcleo, apantallada por los demás electrones), y la función de ondas del sistema se aproxima por un producto de funciones de onda de electrones (u orbitales). De este modo, en una primera aproximación, se deduce la estructura de un átomo a partir de la estructura del átomo de hidrógeno, con un par de salvedades: la carga apantallada puede variar para cada electrón y el principio de Pauli juega un papel en cuanto haya dos o más electrones. Las densidades de carga experimentales podrán interpretarse, en esta aproximación, como la suma de las densidades de probabilidad asociadas a cada orbital. Naturalmente, la misma aproximación se puede utilizar para sistemas más complejos, como las moléculas, aunque habrá que hacer aproximaciones adicionales, como no considerar más que los electrones de valencia. Esta forma de proceder tiene la ventaja de mostrar cómo propiedades relacionadas con la localización de la carga (en las que se basan los modelos de enlace) y propiedades relacionadas con las energías de los estados (en las que se suele basar el modelo de bandas) responden a una única descripción cuántica, lo que permite

una visión más unitaria de la materia condensada.

A partir de las ideas que hemos expuesto, estamos elaborando materiales sobre estructura atómica, teoría del enlace, propiedades del estado sólido, etc., con el fin de analizarlos con otros compañeros y experimentarlos con alumnos. En nuestra opinión, éste es un problema suficientemente complejo para llegar a admitir una única solución. Por ello, aprovechamos esta ocasión para pedir a los Editores de la Revista que animen un debate continuado sobre estas cuestiones de Física Moderna.

Referencias bibliográficas

Ducasse, A., Lalanne, JR., Lalanne, P. y Rayez, J.C., 1985. Concepts modernes sur la structure électronique des molécules et la liaison chimique, *Bulletin de l'Union des Physiciens*, 678, pp. 129-219.

Dumon, A. y Merlin, A., 1988. Difficulties with molecular orbitals, *Education in Chemistry*, 25, pp. 49-52.

Feynman, R., 1971. *Física*. (Fondo Educativo Interamericano: Bogotá).

Gil, D., 1983. Tres paradigmas básicos en la enseñanza de las ciencias, *Enseñanza de las Ciencias*, 1, pp. 26-33.

Gil, D., Senent, F. y Solbes, J., 1986. Análisis crítico de la introducción de la Física moderna, *Revista de enseñanza de la Física*, 2, pp. 16-21.

Gil D., Senent, F. y Solbes, J., 1989. La Física moderna en la enseñanza secundaria: una propuesta fundamentada y unos resultados, *Revista Española de Física*, (pendiente de publicación).

Hodson, D., 1985. Philosophy of Science, Science and Science Education, *Studies in Science Education*, 12, pp. 25-57.

Millar, R. y Driver, R., 1987. Beyond Processes, *Studies in Science Education*, 14, pp. 33-62.

Solbes, J., Bernabeu, J., Navarro, J. y Vento, V., 1988. Dificultades en la enseñanza/aprendizaje de la Física Cuántica, *Revista Española de Física*, 2, pp. 22-27.

Solbes, J., Calatayud, M.L., Climent, J.B. y Navarro, J., 1987a. Errores conceptuales en los modelos atómicos cuánticos, *Enseñanza de las Ciencias*, 5, pp. 189-196.

Solbes, J., Calatayud, M.L., Climent, J.B. y Navarro, J., 1987b. *El modelo cuántico del átomo*. (Ed. Servei Formació Permanent. Universitat de València)

EXPERIENCIAS DE AULA

METODOLOGÍA DE TRABAJO EN INVESTIGACIÓN EDUCATIVA EN UN CURSO UNIVERSITARIO DE QUÍMICA BÁSICA

Andrade Gamboa, Julio, J.; Donati, Edgardo R.; Jubert, Alicia, H.; Stradella, Omar, G. y Vasini, Enrique, J. Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata, Calle 47 y 115, 1900 La Plata, Argentina.

Nuestro grupo de trabajo está formado por docentes del primer año del Departamento de Química de la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata. El objetivo que nos une es la intención de generar y nuclear las condiciones correctivas necesarias para lograr una máxima eficiencia en la asimilación de las habilidades y conocimientos de parte de los alumnos que ingresan en las carreras específicas de nuestro departamento.

En base a un diagnóstico primario acerca de las falencias generales manifestadas en el proceso enseñanza-aprendizaje de nuestros cursos, el trabajo se enmarcó dentro de tres líneas fundamentales:

a) Elaboración de nuevas prácticas.

b) Uso de elementos complementarios en el aprendizaje, de características no convencionales.

c) Estudio de la influencia de la forma y contenido de las evaluaciones sobre la eficacia de las mismas.

Mediante la primera línea de trabajo se sugiere a los docentes el uso de la experimentación para introducir a los alumnos en ciertos temas, especialmente en aquellos que usualmente se desarrollan tan sólo con tiza y pizarrón. Con tal fin se han propuesto introducciones experimentales

Mediante la primera línea de trabajo se sugiere a los docentes el uso de la experimentación para introducir a los alumnos en ciertos temas, especialmente en aquellos que usualmente se desarrollan tan sólo con tiza y pizarrón. Con tal fin se han propuesto introducciones experimentales

Mediante la primera línea de trabajo se sugiere a los docentes el uso de la experimentación para introducir a los alumnos en ciertos temas, especialmente en aquellos que usualmente se desarrollan tan sólo con tiza y pizarrón. Con tal fin se han propuesto introducciones experimentales