

# *El desarrollo histórico de los modelos de átomo y enlace químico y sus implicaciones didácticas*

**Jordi Solbes**  
**Verónica Silvestre**  
**Carles Furió**

Departament de Didàctica de les Ciències Experimentals i Socials.  
Universitat de València.

## **Resumen:**

En este trabajo se realiza una breve introducción histórica de los modelos sobre la estructura atómica y enlace químico. Se muestra, así mismo, como esta historia puede contribuir a mejorar la enseñanza de estos temas y a superar algunas dificultades de los estudiantes.

**Palabras clave:** historia de la ciencia; enseñanza y aprendizaje; estructura atómica y enlace químico.

## **Abstract:**

In this essay, a brief historical introduction on the models of atomic structure and chemical bonding is carried out. This revision of how the teaching of these issues has evolved over the years shows, likewise, how to improve their learning in order to overcome some of the students' difficulties.

**Key Words:** History of science; teaching and learning; atomic structure and chemical bonding.

(Fecha de recepción: mayo, 2010, y de aceptación: septiembre, 2010)

## Introducción

El conocimiento sobre la estructura atómica y enlace químico tiene un papel importante en la educación científica, no sólo por su carácter fundamental, sino porque permite explicar las propiedades de la materia. Por ello, los currículos en nuestro país incorporan la enseñanza de estos modelos, desde 3º de ESO (educación secundaria obligatoria) hasta 2º de Bachillerato, suponiendo que pueden ser comprendidos y asimilados por el alumnado de la ESO.

Así, en 3º de ESO, en el Bloque 3. *Estructura interna de las sustancias*, encontramos *Estructura del átomo*, con Modelos atómicos de Thomson y de Rutherford. En 4º de ESO en el Bloque 4. *Estructura y propiedades de las sustancias. Iniciación al estudio de la química orgánica*, encontramos la *Estructura del átomo y enlaces químicos*, con La estructura del átomo. El sistema periódico de los elementos químicos; Clasificación de las sustancias según sus propiedades. Estudio experimental; El enlace químico: enlaces iónico, covalente y metálico; Interpretación de las propiedades de las sustancias.

En 1º de Bachillerato, en el bloque 7. *El átomo y sus enlaces*, aparece: Primeros modelos atómicos: Thomson y Rutherford. Distribución electrónica en niveles energéticos. Los espectros y el modelo atómico de Bohr. Sus logros y limitaciones. Introducción cualitativa al modelo cuántico; Abundancia e importancia de los elementos en la naturaleza. Sistema periódico, justificación y aportaciones al desarrollo de la química; Enlaces iónico, covalente,

metálico e intermoleculares. Propiedades de las sustancias.

Por último, en 2º de Bachillerato, aparece el bloque 2. *Estructura atómica y clasificación periódica de los elementos*, con: Del átomo de Bohr al modelo cuántico. Importancia de la mecánica cuántica en el desarrollo de la química; Evolución histórica de la ordenación periódica de los elementos; Estructura electrónica y periodicidad. Tendencias periódicas en las propiedades de los elementos. Y el bloque 3. *Enlace químico y propiedades de las sustancias*, con: Enlaces covalentes. Geometría y polaridad de moléculas sencillas; Enlaces entre moléculas. Propiedades de las sustancias moleculares; El enlace iónico. Estructura y propiedades de las sustancias iónicas; Estudio cualitativo del enlace metálico. Propiedades de los metales; Propiedades de algunas sustancias de interés biológico o industrial en función de la estructura o enlaces característicos de la misma.

Pese a la reiteración en la enseñanza del tema, hay diversas investigaciones (Blanco y Níaz, 1998; Fischler y Lichtfeld, 1992; Harrison y Treagust, 2000; Justi y Gilbert, 2000; Kalkanis et al., 2003; Solbes, 1996) que muestran que el aprendizaje sobre los modelos de estructura atómica y enlace químico presenta grandes dificultades, y una proporción alta de estudiantes no consigue una comprensión adecuada de aspectos básicos de los mismos. En este artículo se intenta iluminar esta cuestión recurriendo al análisis histórico. Para ello se analizan las teorías y modelos más utilizados a lo largo de la historia para explicar los átomos y sus

enlaces y, a continuación, se plantean algunas implicaciones didácticas.

Hemos dividido este desarrollo histórico en cuatro partes:

- La primera trata la escuela de Bohr, la explicación de los espectros y a pesar de que no se enseñe, los reglas de cuantificación para sistemas con muchos grados de libertad, que llevan al modelo de Sommerfeld.
- La segunda trata el desarrollo de la mecánica ondulatoria que resolvió las dificultades del modelo de Bohr - Sommerfeld.
- La tercera trata sobre los desarrollos fundamentales que completarán la mecánica cuántica, el espín del electrón y el postulado de simetrización, y que permiten la comprensión de los átomos multielectrónicos.
- La cuarta sobre las primeras aplicaciones de la mecánica cuántica a las diferentes ramas de la química (espectroscopia molecular, enlace químico, sólidos).

En cuanto a la bibliografía utilizada encontramos, por una parte, recopilaciones de artículos originales (Cavendish, 1776; Butler et al, 1972, donde se pueden encontrar artículos de Dalton, Brown, J. J. Thomson, Nagaoka, Millikan, Rutherford, Geiger y Mardsen, Bohr, Moseley, de Broglie, Uhlenbeck y Goudsmit y Chadwick), libros de historia de la ciencia (Asimov, 1975; Kragh, 2007; Mason, 1985; Sanchez Ron, 2007; Taton, 1973; Bensaude-Vincent. y Stengers, 1998; de la Selva, 1993; Delgado, 2004; Gribbin, 2003; Jaffe, 1964), libros de texto, clásicos como el de Pauling

(1971) y mas modernos, con referencias históricas (Atkins, 1985; Centellas et al, 1992); libros de implicaciones de la cuántica en la tecnología (Pimentel, 1994) y, incluso, libros de divulgación (Navarro, 2009).

## **1. La escuela de Bohr.**

### **1.1. Antecedentes al modelo de Bohr.**

#### *1.1.1. Espectroscopia y rayas espectrales.*

El papel fundamental de la espectroscopia con respecto a la estructura del átomo se debe al hecho de que esta no puede ser revelada más que por los fenómenos observables a nuestra escala que son su consecuencia. Por ejemplo, los rayas espectrales.

Los comienzos de la espectroscopia atómica se sitúan en 1.859 con Bunsen y Kirchhoff, que estudian los primeros espectros de emisión: Empezaron a clasificarse las rayas obtenidas en series cuya estructura presentaba grandes analogías en los diferentes elementos, encontrándose que los frecuencias presentan entre sí relaciones regulares. La mas famosa de estas relaciones empíricas es la Ley de Balmer (1.885) para los líneas visibles del hidrógeno:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

donde R es la constante de Rydberg.

El estudio de las rayas espectrales llevó en 1.908 al principio de combinación de Ritz: “Para cada especie de átomos es posible encontrar una sucesión de números llamados términos espec-

trales tales que la frecuencia de cada raya sea igual a la diferencia de dos de esos terminos”.

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Este mismo año Paschen encontró tres rayas de la serie que lleva su nombre.

También se estudiaran las variaciones de frecuencia de las líneas espectrales bajo la acción de campos exteriores. Zeeman (1.896) descubrió desdoblamientos en campos magnéticos que fueron interpretados por Lorentz. Pero el efecto Zeeman anómalo y el efecto Paschen-Back (1.912), así como el efecto Stark (1.913) (desdoblamientos producidos por campos eléctricos) no pudieran ser correctamente explicados. Para eso era necesaria la introducción del espín (como veremos al apartado 3).

### 1.1.2. Modelos de estructura atómica.

A principios de siglo aparecen los primeros modelos atómicos:

- a) Perrin (1.901) imagina en el átomo formado por una partícula positiva alrededor de la que giran como pequeños planetas electrones que compensan la carga total.
- b) Nagaoka (1.904) propone un modelo mas concreto en que los electrones equidistan del núcleo, moviéndose con velocidad angular común.
- c) J. J. Thomson (Phil. Mag. 6 (1.903) 673) describe en el átomo como una esfera cargada positivamente con electrones oscilante con respecto a su centro. Este modelo era el único capaz de conducir a rayas espec-

trales cuyas frecuencias estaban asociadas con las de oscilación.

- d) E. Rutherford (Phil. Mag. 21 (1.911) 669) analizó los experiencias de colisión de partículas  $\alpha$  sobre láminas de Au y Ag. Los resultados experimentales favorecían un modelo atómico en que toda la carga eléctrica positiva y prácticamente toda la masa estuvieran concentradas en un pequeño volumen del espacio denominada núcleo, alrededor del cual y a grandes distancias en comparación con su tamaño se movían de alguna forma los electrones. Por otro lado, Rutherford y sus discípulos demostraran que el modelo de Thomson no podía explicar la dispersión de partículas  $\alpha$ .

Las dificultades del modelo de *Rutherford* aparecieron al estudiar su comportamiento con la teoría electromagnética de Maxwell y la mecánica de Newton. Si la energía del electrón es negativa, este describe una elipse con el núcleo en uno de sus focos. De acuerdo con la electrodinámica clásica, el electrón que está acelerado emite radiación compuesta por una serie de ondas monocromáticas de frecuencia  $\nu$  igual a la frecuencia de giro del electrón o a uno de sus armónicos.

Este proceso de radiación ocasiona pérdida de energía por parte del electrón, produciéndose una caída de este hacia el núcleo en un tiempo  $t \sim 10^{-10}$  s, originando una emisión continua de radiación.

### 1.2. El átomo de Bohr.

Bohr, discípulo de Rutherford en Manchester, trató de buscar una teoría

que compatibilizara el modelo planetario con la estabilidad del átomo y la existencia de rayas espectrales.

En 1.913 publica su teoría: "Sobre la constitución de átomos y moléculas" (Phyl. Mag. 26 (1.913) 1, 476 y 857), en la que introduce las siguientes hipótesis:

*"En la presente memoria nos hemos esforzado en desarrollar una teoría de la constitución de los átomos y de las moléculas sobre la base de las ideas introducidas por Planck con el objeto de explicar la radiación del cuerpo negro y la teoría de la estructura de los átomos propuesta por Rutherford para explicar la dispersión de partículas  $\alpha$  por la materia.*

*Para eso, introducimos las siguientes hipótesis:*

*1. La energía de radiación no es emitida (o absorbida) de forma continua, como admite la electrodinámica clásica, sino solo en el curso de la transición de un estado estacionario del sistema a otro estado estacionario.*

*2. El equilibrio dinámico de un sistema, en sus estados estacionarios, está regido por las leyes de la mecánica ordinaria, pero estas leyes no valen en el tránsito de un estado estacionario a otro.*

*3. La radiación emitida en el curso de la transición de un sistema de un estado estacionario a otro es monocromática: la relación entre su frecuencia y la energía total emitida está dada por  $E=h\nu$*

*4. Los diferentes estados estacionarios de un sistema constituido por un electrón girando alrededor de un*

*núcleo cargado positivamente son determinados por la siguiente condición: la aportación de energía total necesaria para realizar una configuración dada del sistema a la frecuencia mecánica  $\omega$  Del movimiento de rotación del electrón es un múltiplo entero de " $h$ ".*

$$\frac{E}{\omega} = n \frac{h}{2}$$

Si se admite que la órbita del sistema es circular, esta condición es equivalente a la siguiente: el momento cinético del electrón es un múltiplo entero de  $\hbar$ .

El estado permanente (o fundamental) de todo sistema, es decir, el que corresponde al máximo de energía emitida, está determinado por la condición que el momento cinético de cada electro alrededor de su órbita sea  $\hbar$ .

En sus cálculos Bóhr utilizó el modelo de los órbitas circulares (con un solo grado de libertad) porque en 1.913 aún no se había desarrollado el método para cuantificar sistemas de  $n$  grados de libertad.

Reprodujo así la Ley de Ritz,

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^3} Z^2 \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

Donde vemos que la constante R se expresa por medio de los constantes fundamentales:  $e$ ,  $m$  y  $h$ .

### **1.3. Evidencias experimentales del modelo de Bohr.**

#### **1.3.1. Evidencias espectroscópicas.**

Bohr advirtió la perfecta concordancia entre su ley de frecuencias con la

serie empíricamente obtenida por Balmer en 1.885 a  $n_2=2$ .

La serie correspondiente a  $n_2=1$ , cuyas rayas pertenecen al ultravioleta, fue observada por Lyman en 1.914.

La serie correspondiente a  $n_2=3$  fue observada por Brackett, así como la serie correspondiente a  $n_2=4$ . Las otras series (Pfund) se sitúan en el infrarrojo lejano.

Además, Bohr extendió su teoría a los átomos hidrogenoides (helio ionizado) encontrando que en la ley de frecuencias aparecía la constante de Rydberg multiplicada por cuatro. Algunas rayas de la serie  $n_2=2$  han sido observadas por Lyman.

La serie  $n_2=3$  fue observada por Fowler, Paschen y Evans entre 1.912 y 1.916.

La serie  $n_2=4$  se despliega igualmente, dando por una parte la serie de Balmer y, de otra, una serie que Pickering había descubierto en 1.896 en el espectro de una estrella y que equivocadamente atribuyó al hidrógeno.

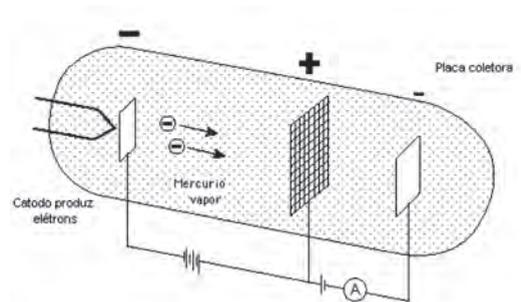
Por otro lado, se encontró que la  $R$  del hidrógeno no coincidía con la del helio. Para tener en cuenta la diferencia bastó considerar que el núcleo no es rigurosamente inmóvil, lo que conduce, como Bohr mismo había mostrado a multiplicar la  $R$  por la masa reducida  $Mm/M+m$ , siendo  $m$  la masa del electrón y  $M$  la del protón.

Se puede así, como hicieron Fowler y Paschen, comparar los espectros del H y de la He y determinar la relación  $m/M$  en el H. El resultado es igual a  $1/1.840$ , en perfecto acuerdo con la determinación directa que había dado Millikan.

### 1.3.2. El experimento de Franck y Hertz.

La interpretación de los espectros atómicos estableció sin ninguna duda, pero de forma indirecta, la existencia en los átomos de una serie de niveles de energía estacionarios de acuerdo con la hipótesis de Bohr.

Fueron Franck y Hertz (Verh. Deut. Phys. Ges. 16 (1.914) 457 y 512), los que en una serie de experimentos dieran una confirmación directa de su existencia.



Cuando el potencial  $V$ , es igual a cero, los electrones provenientes del filamento caliente no tienen energía suficiente para llegar a la placa colectora al no poder vencer la diferencia de potencial entre la rejilla y la placa. A medida que  $V$  aumenta, llegan más electrones a la placa, y muchos de ellos habrán chocado en su camino con átomos de Hg, sin haber transferido prácticamente energía (colisión elástica).

Si se admite la existencia real de los estados estacionarios, es de esperar que cuando  $V=5$  V, los electrones empiezan a sufrir colisiones inelásticas, dejando algún átomo en su primer estado excitado y perdiendo, por lo tanto, casi toda su energía, ya que el primer esta-

do excitado dista del fundamental unos 4,86 eV, se observe una caída brusca de la corriente. Si es continua, aumentando V los electrones después del choque inelástico, tienen aún energía suficiente para llegar a la placa y la corriente aumentará de nuevo hasta que V sea igual a 10 V, momento en que los electrones podrán chocar dos veces inelásticamente y se observará una nueva caída de la intensidad de la corriente.

#### **1.4. Reglas de cuantificación para sistemas con muchos grados de libertad.**

La teoría de Bohr no tardo en atraer la atención general de los físicos, convirtiéndose su desarrollo en una obra colectiva. Así el modelo inicial de Bohr se extendió a sistemas mecánicos más complejos.

En su teoría, Bohr había establecido el siguiente teorema:

*“En todo sistema compuesto de electrones y núcleos en que los núcleos sean fijos y los electrones describan órbitas circulares (con  $V < 0$ ), la energía cinética es igual a  $\frac{1}{2}$  de la energía potencial”.* Inspirándose en este resultado W. Wilson estableció las condiciones de cuantificación para un sistema conservativo de n grados de libertad, estableciendo que:

$$\oint p_k dq_k = n_k h$$

El año siguiente (1.916) Epstein, Schwarzschild y Sommerfeld estudiaron las condiciones de cuantificación para sistemas cuasi periódicos de variables separables (varias variables varían periódicamente con períodos diferentes,

lo que permite descomponer la integral de acción en varias integrales dependientes de una variable.

Como aplicación de los reglas de cuantificación se estudió el átomo hidrogenoide. Se encontró que además de cuantificarse la energía (obteniendo la fórmula de Bohr), se cuantifica el módulo del momento angular y su tercera componente.

$$\begin{aligned} L_z &= m\hbar & m: \text{n}^\circ \text{ cuántico magnético} \\ L &= n_\psi \hbar & n_\psi: \text{n}^\circ \text{ cuántico acimutal} \end{aligned}$$

Este resultado se conoce como cuantificación espacial. Desde el punto de vista clásico, esta cuantificación es absurda mientras no exista un agente externo que determine una dirección privilegiada del espacio (por ejemplo, un campo magnético uniforme).

Al nivel asociado al número cuántico principal “n” le corresponden n tipos de órbitas cuantificadas, caracterizadas por los valores del número cuántico acimutal  $n_\psi = 1, \dots, n$ . Para cada uno de ellos la órbita tiene  $2n_\psi + 1$  orientaciones espaciales.

#### **1.5. Estructura fina.**

Uno de los éxitos más espectaculares y que mas ayudaron a aceptar las reglas de cuantificación fue el estudio realizado por Sommerfeld (Ann. Phys. (Leipzig) 51 (1.916) 1 y 125) de los átomos hidrogenoideos en el marco de la teoría de la relatividad y que le permitió dar una explicación teórica de la estructura del átomo de H (descubierta por Michelson en 1.991).

Anteriormente ya Bohr se había ocupado del tratamiento relativista de su modelo atómico y había propuesto considerar los dobletes del espectro de H como un efecto de orden  $v^2/c^2$ . Pero el desarrollo sistemático esta teoría fue el de Sommerfeld: encontró que la energía dependía de “n” y “n<sub>ψ</sub>”.

$$En_{m_{\psi}} = -\frac{1}{2}me^2 \frac{z^2\alpha^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{z^2\alpha^2}{n} \left( \frac{1}{n_{\psi}} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

donde  $\alpha$  es la constante de estructura fina

Esta fórmula descompone la energía en dos términos: uno correspondiente a la energía de Bohr y otro asociado a la corrección relativista.

No solo le permitió explicar la estructura fina del H, sino que también estaba de acuerdo con los medidas de Paschen en el átomo de He ionizado.

El acuerdo de esta ecuación con los resultados experimentales fracasó en átomos no hidrogenoides (los resultados exactos solo se obtienen con la ecuación de Dirac).

### 1.6. Crítica a la teoría de Böhr.

El mismo Bohr era consciente de que su modelo era una alianza extraña entre teorías clásicas y métodos cuánticos introducidos “ad hoc” para restringir el número de órbitas clásicas posibles.

Por otro lado, solo era capaz de calcular la frecuencia de las rayas emitidas pero no su intensidad ni su estado de polarización.

Además, Kramers, al calcular el potencial de ionización del átomo de He

obtuvo resultados en desacuerdo con la experiencia.

También hay que consignar el fracaso de Sommerfeld en los átomos complejos.

## 2. La mecánica ondulatoria de Schrödinger.

Este apartado resume el trabajo de Solbes y Sinarcas (2009), donde vemos como Einstein recalcó la importancia de los trabajos de Louis de Broglie y como Schrödinger, partiendo de la idea fundamental de éste último (“la óptica geométrica es a la óptica ondulatoria como la mecánica clásica debe ser a la mecánica ondulatoria”), escribió sus famosos artículos base de la mecánica ondulatoria (Ann. Phys. 79 (1926) 109, 361, 437 y 489).

En el primero de ellos Schrödinger obtuvo la ecuación

$$\left[ -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \cdot \Psi(\vec{r})$$

que se conoce con el nombre de “ecuación de Schrödinger para estados estacionarios”.

Para demostrar el poder de su nuevo esquema resolvió, en otro artículo, el problema del átomo de hidrógeno, el del oscilador armónico y los efectos de Stark y Zeeman. Para el átomo de hidrógeno encontró que no existen soluciones mas que para ciertas energías del electrón, que son los valores propios de la ecuación y coinciden con los resultados de Bohr; aunque la degeneración correspondiente a un nivel energético no coincidió con la del modelo de Som-

merfeld ya que los valores posibles para el momento angular no son  $n_{\Psi} = 1, \dots, n$  sino  $l = 0, \dots, n-1$  y por lo tanto la degeneración es  $\Sigma(2l+1) = n^2$ .

En cuanto al oscilador lineal obtuvo que la energía es igual a

$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) h\nu$$

como parecían indicar los fenómenos en que intervenía la cuantificación del oscilador (por ejemplo, los espectros de bandas de las moléculas biatómicas).

No pudo explicar el efecto Zeeman anómalo por no introducir el espín del electrón.

También se ocupó del sentido físico de  $\Psi$ : consideró que el electrón estaba difundido en el átomo y que su carga estaba repartida de forma continua, de manera que

$$e\Psi^*(q,t)\Psi(q,t)$$

es la densidad de carga. Todo pasa como si esa distribución que varía con el tiempo irradiara según las leyes clásicas.

Sobre este punto tuvo una serie de discusiones en Copenhague (donde fue invitado por Bohr) que se resolvieron con el abandono de esta concepción, ya que el proceso de emisión por transiciones cuánticas es demasiado discontinuo para que pueda representarse por la emisión clásica de una distribución. El problema se soluciona cuando Max Born en 1926 introdujo la interpretación probabilística de la función de ondas de Schrödinger, de manera que  $\Psi^*\Psi$  representa la densidad de probabilidad de encontrar al electrón, de que se produzca una transición, etc., según el estado que represente  $\Psi$ .

### 3. Desarrollos fundamentales: el espín y las partículas idénticas.

#### 3.1. El espín: Antecedentes históricos.

La mecánica cuántica no está completa si no es tienen en cuenta el *espín* y el postulado de simetrización (ambos debieron ser introducidos “*ad hoc*”).

Como ya hemos visto, quedaban una serie de hechos de orden espectroscópico y magnético que no habían podido ser explicados: entre ellos las estructuras finas de los átomos complejos, el efecto Zeeman anómalo, el efecto Stern y Gerlach y las anomalías giromagnéticas.

Estos hechos solo pudieron ser explicados con la introducción del *espín*. Estudiaremos detenidamente los fenómenos y las hipótesis.

##### 3.1.1. Estructura fina y anomalías giromagnéticas

Como ya vimos la teoría de Sommerfeld preveía los estructuras hasta de los átomos hidrogenoides, pero era incapaz de explicar la de los átomos más complejos.

Por otro lado, Einstein y de Hass primero, y Burnett después, estudiaron las anomalías giromagnéticas: si se imanta una barra de hierro cilíndrica suspendida por un punto de su eje, debe ponerse a girar; y recíprocamente, si se hace girar, es crea un momento magnético. La relación entre el momento magnético y el angular era el doble de la prevista. Esto hacía suponer que todo el magnetismo no tenía su origen en el momento angular.

### 3.1.2. Evidencias espectroscópicas.

En 1897 Zeeman descubrió que la presencia de campos magnéticos externos influían en el proceso de emisión de luz por los átomos, al observar que en un campo magnético,  $\mathbf{B}$  de 32 kgaus la línea azul del cadmio, de longitud de onda 4800 Å, daba origen a un triplete de líneas equidistantes, coincidiendo la línea central del triplete con la posición de la línea original.

Inmediatamente se observó el mismo efecto en algunas otras líneas del cinc y del cadmio que no presentaban estructura fina, y se encontró que la separación entre los líneas del multiplete era proporcional a  $\mathbf{B}$  e independiente del átomo considerado.

Este efecto, conocido como efecto Zeeman normal, fue explicado clásicamente por Lorentz en 1897.

Supuso que el momento magnético del átomo era proporcional al momento angular de los electrones

$$\overline{M} = \frac{e}{2mc} \overline{L}$$

Cuando se coloca el átomo en un campo magnético interactúa su momento magnético con el  $\mathbf{B}$  exterior, por lo tanto el campo agrega al electrón una energía.

Pero a finales de 1897, Preston dejó ya patente que había casos en que el desdoblamiento era diferente del que había observado Zeeman.

Experiencias posteriores permitieron afirmar que cada una de los rayas espectrales de la estructura fina, en presencia de  $\mathbf{B}$  daban multipletes de muy variadas multiplicidades, y que si bien las líneas que se originaban eran

equidistantes, las distancias entre los mismas no solo dependían del campo magnético, sino también de la raya espectral considerada.

Este nuevo efecto se denominó efecto Zeeman anómalo, el cual solo puede ser explicado cuando se considera el acoplamiento *Espín-órbita*.

### 3.1.3. Efecto Stern-Gerlach.

En 1922 Stern y Gerlach encontraron el efecto que lleva su nombre.

En primer lugar, produjeron un haz de átomos de plata evaporando este metal en un horno y dejando que un haz de ellos salieran colimados a través de una serie de aperturas. Este haz dirigido según el eje  $x$ , se hacía entrar en un recipiente con un vacío elevado y en el que se había establecido un campo magnético, no homogéneo, según la dirección  $z$ .

Como los átomos de plata son paramagnéticos, poseen un momento magnético permanente  $\mu$  y, por lo tanto, interaccionaran con el campo.

Al final del imán, un átomo cualquiera (que describirá una trayectoria aproximadamente parabólica) se desviará ligeramente en la dirección  $x$  un ángulo

$$\theta \approx \left( \mu_z \frac{L}{2Ec} \right) \left( \frac{\partial B}{\partial z} \right)$$

Por lo tanto, la reflexión del haz es proporcional a la componente del momento magnético según la dirección  $z$ . Si  $\mu_z$  pudiese tomar cualquier valor en el intervalo, los impactos de los átomos sobre una pantalla, formarían una mancha alargada en la dirección  $z$ . Sin

embargo, en cambio, Stern y Gerlach observaron dos taqués, precisamente los canto superiores e inferiores de la que clásicamente cabría esperar.

Esto demuestra claramente la cuantificación de  $\vec{S} \cdot Y$ . Y, como, de acuerdo con la teoría de la susceptibilidad paramagnética de Langevin, el momento magnético debe considerarse proporcional al momento angular, el resultado del experimento probaba directamente la cuantificación del momento angular.

Pensamos, no obstante, que si el momento angular fuera un múltiple entero de  $n$  de "h", como indican las reglas de cuantificación de Sommerfeld, entonces siempre aparecerán un número impar ( $2n_p + 1$ ) de manchas y nunca un número par como pasaba en el caso de la plata. Esta contradicción solo podrá ser superada con la introducción del espín.

Pero dado que el átomo de plata no se conocía muy bien, en 1927 Philips y Taylor, realizaron el mismo experimento con el átomo de hidrógeno que al ser conocido permitía predicciones sin ambigüedades.

Si el electrón del hidrógeno se encuentra en su estado fundamental "s", entonces la tercera componente del momento angular será nula y, por lo tanto, según la teoría de Langevin, el haz no debería dividirse. Al contrario, Philips y Taylor encontraron que el haz también se dividía en dos componentes simétricas. Evidentemente esto implica la existencia de algún momento magnético en el átomo que hasta entonces no se había considerado.

### 3.2. La hipótesis del espín: Pauli y Uhlenbeck y Goudsmith.

Uhlenbeck y Goudsmith, discípulos de Erhenfest, introdujeron la idea del espín estudiando un artículo de Pauli en el que formulaba su principio de exclusión y en que, por primera vez se le asignaban cuatro números cuánticos al electrón.

Según sus propias palabras:

*"Esto estaba hecho de una manera demasiado formal [...] Para nosotros estaba clara la proposición de que cada número cuántico corresponde a un grado de libertad y, por otro lado, la idea de un electrón puntual, que obviamente solo tiene tres grados de libertad, implicaba que no había lugar para un cuarto número cuántico. Solo podíamos entender este considerando al electrón como una pequeña esfera que pudiese girar..."*

*"Algún tiempo después Erhenfest dirigió nuestra atención hacia un artículo de Abraham en el que podía entenderse clásicamente el necesario factor 2 en el momento magnético ( $g = 2$ ) para una esfera giratoria con superficie cargada. Esto nos animó pero nuestro entusiasmo se redujo notablemente cuando vimos que la velocidad de giro en la superficie del electrón debería ser varias veces la velocidad de la luz."*

*"Nuestra idea nos pareció tan especulativa que no teníamos la intención de publicar nada, máxime cuando Bohr, Heisenberg y otras autoridades nunca habían propuesto nada semejante. Pero Erhenfest complacido por el carácter visual de*

*nuestra hipótesis nos animó a continuar llamando nuestra atención sobre varios puntos como, por ejemplo, sobre el hecho de que en 1921 Compton había sugerido ya la idea de un electrón giratorio como posible explicación de la unidad natural de magnetismo, diciéndonos finalmente, que ya fuera algo importante o un sin sentido debíamos publicarlo.”*

Posteriormente, con la ayuda de Lorentz encontraron que la imagen del electrón *giratorio* podría producir dificultades muy serias. En efecto, la energía magnética sería tan grande que a causa de la equivalencia masa - energía, el electrón debería tener una masa más grande que la del protón.

### **3.3. Sistemas de partículas idénticas. Principio de exclusión de Pauli.**

Ya hemos introducido el espín; ahora por completar la mecánica cuántica debemos tener en cuenta que así como clásicamente dos partículas de la misma naturaleza son idénticas, en mecánica cuántica hay que renunciar completamente a la posibilidad de distinguir dos partículas de la misma naturaleza de un mismo sistema y ver como identificar dos estados de un sistema que no difieren el uno del otro más que por la permutación de estas dos partículas.

Esta permutabilidad tiene consecuencias muy importantes. Así, si permutando las coordenadas de dos partículas de un sistema, la función de ondas no cambia su valor, decimos que es simétrica en relación a estas partículas.

Por otra parte, si permutándolas cambia de signo, decimos que es antisimétrica.

Eso nos lleva a que dado un sistema físico de partículas idénticas, las funciones de onda que describen sus estados deben ser todas simétricas o todas antisimétricas.

Empíricamente se había encontrado que los niveles energéticos se saturan sucesivamente por la agregación de nuevos electrones: la regla de Stoner nos indicaba el número máximo de electrones que cada nivel energético podía recibir.

Esta saturación es debida a la imposibilidad por dos electrones de poseer estados cuánticos rigurosamente idénticos: eso es conocido con el nombre de principio de exclusión de Pauli (1925). Es equivalente a decir que por los electrones los únicos estados realizados en la naturaleza son los antisimétricos.

### **3.4. Aplicaciones.**

La consideración del espín y el principio de Pauli ha conducido a numerosos éxitos, entre los que hay que destacar:

#### *3.4.1. Interpretación del espectro de helio.*

Experimentalmente se conocía que las rayas del helio se dividían en dos categorías separadas, correspondientes a términos que en primera aproximación no se combinaban. Estos dos sistemas de rayas recibieron el nombre de espectros del ortohelio y del parahelio.

Eso, como explicó Heisenberg en su memoria de 1925, es debido a que los electrones del átomo de helio siguen el

principio de exclusión y, por lo tanto, sus funciones de onda deben ser anti-simétricas con relación a las coordenadas y al espín, pero pueden serlo de dos modos: simétricas con respecto a los coordenadas y antisimétricas con respecto al espín o viceversa.

Hay dos categorías de funciones de onda, y por lo tanto de términos espectrales: identificó una con el ortohelio y otra con el parahelio.

También explicó la estructura fina de ambos: las rayas del parahelio son simples y las del ortohelio dan origen a tripletes.

#### *3.4.2. La molécula de hidrógeno.*

Las teorías clásicas permitirían comprender el origen del vínculo que une los átomos de una molécula heteropolar (por atracción entre iones) pero no así el del homopolar. Es la mecánica cuántica la que ha permitido comprenderlo, gracias a la introducción de los energías de intercambio, que sotes termita que aparecen en el lado de las interacciones coulombianas (núcleos con electrones y electrones entre sí) unido a la posibilidad de permutar las partículas idénticas,.

Es mas, no hay energía de intercambio más que cuando dos partículas idénticas tienen probabilidad no nula de encontrarse en una misma región del espacio.

En 1927 W. Heitler – F. London estudiaron el caso mas simple: la molécula  $H_2$ , con solo dos electrones, encontrando que si los espines de los electrones tienen el mismo sentido, la energía de intercambio corresponde a una repul-

sión entre átomos y no puede formarse ninguna molécula. Por contra, si los espines son de sentido contrario, la energía de intercambio corresponde a una atracción entre átomos.

Como el par de electrones con espines opuestos tiene gran estabilidad sirve de vínculo entre los dos átomos.

Eso permite dar una explicación de la noción de valencia y puede ser generalizado para la formación de todas las moléculas biatómicas: los electrones desapareados de un átomo tienen tendencia a unirse a los electrones en idénticas condiciones de otro átomo para formar un par.

### ***4. Aplicaciones de la mecánica cuántica a la química.***

Dada la amplitud del tema es prácticamente imposible averiguar todas las aplicaciones que ha tenido la mecánica cuántica en las diversas ramas de la química.

Por ello, solo vamos a estudiar las primeras y mas importantes, es decir, aquellas que dieron inicio al punto de vista cuántico de cada disciplina.

#### ***4.1. Espectroscopia de átomos con muchos electrones y espectroscopia molecular.***

Para sistemas con varias partículas sabemos establecer la ecuación de Schrödinger, pero no resolverla rigurosamente. Nos vemos reducidos así a métodos de aproximación: para electrones en átomos una aproximación satisfactoria consiste en considerar a cada electrón como sometido a un campo

central, creado por el núcleo y por la distribución media de los otros electrones. Es lo que se denomina campo auto-consistente de Hartree (1928).

Los números cuánticos  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  y  $m_s$  sirven para definir los estados de los átomos, no obstante, la energía de estos no depende más que de los números “ $n$ ” y “ $l$ ”. En una segunda aproximación debemos considerar la diferencia que existe entre el campo central y el real, utilizando el momento orbital y el momento de espín del electrón como vectores ordinarios. Se obtiene así un modelo vectorial del átomo, en que se determina el momento angular total  $J$  mediante las reglas de adición de vectores. Hay dos métodos:

a) Acoplamiento de Russel y Saunders, para átomos ligeros que consiste en calcular

$$\sum_i \vec{l}_i = \vec{L}; \sum_i \vec{s}_i = \vec{S} \Rightarrow \vec{L} + \vec{S} = \vec{J} (i = n^o d^1 e^-)$$

b) Acoplamiento j-j por átomos pesados que consiste en

$$\vec{l}_i + \vec{s}_i = \vec{j}_i \Rightarrow \sum_i \vec{j}_i = \vec{J}$$

Una última aproximación da cuenta de las acciones mutuas entre  $S$  y  $L$ : acoplamiento espín-órbita responsable de la escisión en multipletes de los niveles  $nl$ . Permite explicar los efectos Zeeman anómalos y la fórmula de Landé.

Si se tienen en cuenta que las propiedades magnéticas de los núcleos ejercen influencia sobre los espectros ópticos, podemos explicar la estructura hiperfina.

A finales del s. XIX se conocían espectros de absorción y emisión de vapores de moléculas. En el visible y en el

ultravioleta estos espectros tenían un número mayor de líneas que los atómicos hasta el punto de poder agruparse en bandas. En 1885 Deslanhes estableció de una forma empírica una fórmula por explicar la distribución de las líneas en las bandas.

Posteriormente se descubrieron los espectros de las moléculas en el infrarrojo lejano (1925) y en microondas (1940), que eran más sencillos que el ultravioleta. Estos espectros fueron explicados por Born y Oppenheimer en 1927 suponiendo que existían bandas electrónicas, bandas de rotación y bandas de vibración.

#### 4.2. Química cuántica.

Aunque de naturaleza esencialmente física, las nuevas concepciones sobre la estructura del átomo, fueron aplicadas rápidamente a la química, fundamentalmente al problema del enlace.

En 1927 W. Heitler y F. London abordaron el problema de la molécula de hidrógeno. Esta teoría fue extendida en moléculas más complejas por Pauling, Slater, Born, Weyl, etc. Esta concepción denominada “teoría del enlace de valencia” se refiere a la concentración de electrones apareados entre átomos enlazados, a las propiedades direccionales de los enlaces y a la estructura molecular, señalando la importancia de la naturaleza atómica original del sistema.

El método del orbital molecular fue introducido por Burrau en 1927 y desarrollado por Hund, Mulliken y Lennard-Jones en 1932. Se forman las moléculas mediante un sistema de orbitales que

van siendo ocupados por los electrones siguiendo las mismas reglas de los átomos.

Bethe y Kramers desarrollan la teoría del “campo cristalino”. Consideran las moléculas complejas como sistemas electrostáticos formados por cargas puntuales y dipolos.

Van Vleck demostró en 1935 que estas tres interpretaciones eran equivalentes. A pesar de todo, conocieron un éxito desigual: de 1930 a 1940 la teoría del enlace de valencia tuvo gran acogida por los químicos, después de 1945 gracias al estudio de los electrones excitados de las moléculas, los orbitales moleculares y el campo cristalino consiguieron más éxito. Los orbitales moleculares explicaban el paramagnetismo y el diamagnetismo de las moléculas, que habían estado estudiados macroscópicamente por Langevin y Curie. La interpretación del ferromagnetismo fue dada por Heisenberg en 1928, quien atribuyó a la energía de intercambio (de la que ya hemos hablado) el origen de los campos moleculares de Weiss.

El concepto de resonancia, introducido por Heisenberg en 1926 en su estudio del átomo de helio, fue aplicado por Pauling, Huckel y Slater a las moléculas, pues una sencilla fórmula estática no puede explicar sus propiedades.

Slater fue junto a Pauling quien más contribuyó al establecimiento de la química cuántica como disciplina, independientemente de que fuera físico, ya que nunca consideró la estructura molecular y la física del estado sólido como dos campos separados. Se formó en Europa. Intentó conciliar la teoría de los cuantos de luz con la electrodinámica y colaboró

con Bohr y Kramers en el artículo de 1924 donde se cuestionaba la conservación de la energía en los procesos individuales microscópicos (desintegración  $\beta$ ), de lo que se exculpó repetidamente. Su principal contribución son los determinantes de Slater, utilizados para que la función de ondas total de un sistema de electrones sea antisimétrica (según exigen el principio de exclusión y el postulado de simetrización).

Pauling estuvo de 1926 a 1928 a Europa, primero a Múnich, donde conoció a Heitler y London, cuya teoría empezó a aplicar en moléculas más complejas, publicando un breve artículo en 1928. Después en Zúrich con Schrödinger. En 1931, estimulado por Slater, publicó una descripción detallada de la mecánica cuántica del enlace covalente. Estos trabajos culminaron en el tratado *The nature of chemical bond* de 1939. También publicó una *Química general*, el año 1947, muy remarcable y reeditada. Sugirió la posibilidad de que las moléculas proteicas tuvieran una estructura helicoidal, avanzándose a los descubrimientos que hicieron Watson y Crick en el ADN, y contribuyó al estudio de la hemoglobina anómala que deforma los glóbulos rojos y provoca la enfermedad conocida como la anemia falciforme. El año 1945 fue galardonado con el Premio Nobel de Química.

Sin embargo, además de sus inestimables contribuciones al conocimiento de la estructura molecular, destaca su personalidad afable y su comprometida oposición al despliegue de armamento atómico, por lo que organizó numerosas campañas contra los experimentos nucleares. El año 1952 fue víctima de

la persecución iniciada por McCarthy contra intelectuales acusados de anti-patriotas y le fue retirado el pasaporte. En plena guerra fría, el año 1958, publicó *No More War!* Eso le convirtió en una de las pocas personas que volvió a recibir un Premio Nobel, ahora en un ámbito diferente, el de la Paz de 1963.

### 4.3. Estado sólido.

Vamos a reseñar a continuación las aplicaciones de la vieja teoría cuántica y de la mecánica cuántica a:

#### 4.3.1. Metales, aislantes y semiconductores.

La antigua teoría de los electrones de Drude y Lorentz trataba de explicar las propiedades de los metales, especialmente su aptitud para conducir calor y electricidad. Supuso que los átomos estaban ionizados y que esta ionización daba origen a un gas de electrones libres. A pesar de eso, esta teoría tenía dificultades: una de los más importantes fue la del calor específico de los metales.

En 1926 Sommerfeld aplica a los electrones libres del metal la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico y la estadística de Fermi y Dirac obteniendo así niveles energéticos discretos y la distribución de equilibrio de los electrones (viendo como es afectada por campos eléctricos, variaciones de temperatura y de concentración). Su teoría explica la ley de Wiedeman-Franz (la relación entre las conductividades térmica y eléctrica es constante a una temperatura dada) y la ley de

Richardson para la extracción de electrones en metales.

En 1928 Frenkel, Houston y Bloch estudian el problema de la conducción reduciéndolo a la difusión de ondas electrónicas por la red cristalina, de manera análoga a la dispersión de rayos X descubrimiento realizado por Von Laue en 1912 e interpretado posteriormente por Bragg. Encontraron que a 0 K no hay dispersión, solo reflexión selectiva de ondas que satisfacen la ley de Bragg

$$n\lambda = 2dsen\theta$$

A temperatura ambiente hay agitación térmica proporcional a la temperatura y, por lo tanto, dispersión, de manera que la longitud de onda es proporcional a la temperatura y la conductibilidad a la inversa de la temperatura. También encontraron que los niveles no están escalonados regularmente como había obtenido Sommerfeld.

La “Teoría de bandas” fue entrevista por Strout en 1927 y desarrollada poco después por Brillouin, Peierls y Morse. El movimiento de los electrones en un cristal como consecuencia de la periodicidad de la red cumple que su energía está comprendida en ciertas bandas, cuyos límites corresponden a longitudes de onda que satisfacen las condiciones de Bragg. Entre bandas permitidas existen bandas prohibidas, lo cual permite la distinción entre aislantes y semiconductores, electrones ligados y semilibres.

#### 4.3.2. Sólidos iónicos.

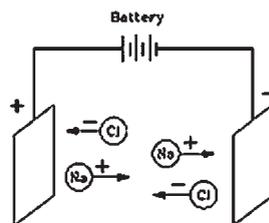
La gran diferencia de comportamiento de conductores y aislantes se había observado antes del descubri-

miento de la conducción eléctrica. Gilbert había clasificado los materiales según la facilidad para ser electrizados. A los que pudo electrizar los denominó *eléctricos*; a los que no (metales y otros materiales), los denominó *no eléctricos*. Cuando Gray descubrió la conducción, Du Fay demostró que todos los materiales podían electrizarse pero que debía tenerse cuidado de aislar del suelo (o del experimentador) los no eléctricos de Gilbert para que no se escapara rápidamente la carga. Empleando únicamente la sensación fisiológica para la detección Cavendish –no contaba con instrumentos adecuados para sus investigaciones, así que medía la fuerza de una corriente eléctrica sometándose a la misma y calculaba su intensidad por el daño que le provocaba– comparó los posibilidades conductoras de muchas sustancias.

*“A partir de unos experimentos, de los que me propongo presentar en breve una relación delante de esta Sociedad, parece ser que el alambre de hierro conduce 400 millones de veces mejor que agua de lluvia o agua destilada –Es decir, la electricidad no encuentra mas resistencia por atravesar un trozo de alambre de hierro de 400000000 pulgada de longitud que por atravesar una columna de agua de tan solo una pulgada de longitud. El agua de mar, o una solución de una parte de sal en 30 de agua, conduce 100 veces, o una solución saturada de sal marina 720 veces, mejor que la agua de lluvia.”*

Esta fue la primera vez que se señalaba que la conductividad del agua aumentaba disolviendo una sal.

La noción de ión surgió por vez primera en química. Como ya hemos introducido, en el siglo XIX era bien conocido que el agua donde se disolvían sales (o ácidos, o bases) conducía la electricidad y que una corriente eléctrica podía separar las sustancias disueltas en sus componentes. La respuesta al por qué de este comportamiento la dio en 1884 Svante Arrhenius, cuando publicó su tesis sobre conductividad eléctrica



En soluciones salinas propuso que, cuando se disuelve en agua un compuesto como la sal común NaCl (cloruro sódico), se divide en sus “iones” (en griego “aquellos que se mueven”) cargados eléctricamente  $\text{Na}^+$  y  $\text{Cl}^-$ . Las fuerzas eléctricas hacen que el ion  $\text{Na}^+$  se mueva en una dirección y el ion  $\text{Cl}^-$  en la opuesta y que es así como se transporta la corriente eléctrica. Aunque al principio pareció una idea extraña, desde que en 1887 publicó un trabajo sobre disociación iónica donde introduce el concepto de ión, hoy se entiende perfectamente; y la clasificación de sólidos iónicos no resulta nada extraña. Es forman muchas moléculas cuando los átomos comparten electrones, pero el NaCl es diferente. Allí, el átomo de sodio (Na) cede un electrón al cloro (Cl), creando iones  $\text{Na}^+$  y  $\text{Cl}^-$ , que en la sal sólida están unidos por su atracción eléctrica. El agua, no obstante, debilita grandemente esta atracción (a escala

microscópica), permitiendo a los iones moverse libremente en el momento que la sal se disuelve en la agua y permiten que el agua se haga conductora de la electricidad.

#### 4.3.3. *Sólidos covalentes.*

El descubrimiento de la estructura electrónica de los átomos, la descripción del modelo nuclear y de los estados estacionarios de los electrones en la envoltura atómica, y la formulación de una nueva ley periódica para las propiedades de los elementos químicos basada en la carga nuclear de los átomos constituyen premisas para penetrar en la naturaleza del enlace químico que esperaba una coherente explicación a mediados del siglo pasado.

En 1916 se publican los trabajos del físico alemán W. Kossel y del químico físico de la Universidad de California G. N. Lewis, que presentaran una notable resonancia en el tratamiento posterior de este problema. Kossel, de la Universidad de Múnich, fue el primero a postular la posible transferencia electrónica de un átomo electropositivo hacia otro electronegativo como mecanismo de formación del renombrado enlace iónico, que supone su fortaleza por la fuerza electrostática desarrollada entre las especies cargadas con signo opuesto. La idea de la posible existencia de dos tipos de compuestos con enlaces polares y apolares expuesta inicialmente por Lewis en 1916, fue complementada en los años siguientes cuando formula la tesis que el enlace en los sustancias moleculares es el resultado del compartimiento de uno par de electrones por

parte de los átomos unidos, que expresan tendencia a llegar a la configuración electrónica del gas noble que le sucede en la Tabla Periódica de los elementos. Estos modelos sotes una primera visión sobre enlace químico. Pero la necesaria profundización llegó a partir de 1927 cuando se introducen en el pensamiento químico las ideas de la mecánica cuántica. En 1927, un año después de la publicación del artículo de Schrödinger en el que fue propuesta la ecuación de onda que lleva su nombre, el físico alemán W. Heitler y el físico inglés F. London, antes mencionados, desarrollaran el cálculo mecánico cuántico de la molécula de hidrógeno, que dio una explicación cuantitativa del enlace químico. En esencia el cálculo vino a demostrar que durante el acercamiento de dos átomos con electrones de espines opuestos ocurre un aumento de la densidad de la nube electrónica en el espacio entre los núcleos, que se acompaña con una disminución considerable de la energía del sistema. Surge el enlace con la formación así de un sistema mes estable.

Empezaría a desarrollarse un nuevo sistema de categorías para explicar las características del enlace químico. Algunos de los conceptos que emergen con un contenido cualitativamente distinto son los de orbital atómico y orbital molecular que ahora designan regiones que con determinada probabilidad es encuentra la nube de electrones; las nociones de energía de enlace para indicar su fortaleza, radio o distancia internuclear media para señalar las posiciones relativas de los núcleos, densidad electrónica relativa para denotar la existencia de los lugares activos res-

ponsables de la reactividad, y orden de enlace para advertir la multiplicidad que presentan los átomos al enlazarse.

### **5. Implicaciones didácticas de la fundamentación histórica.**

El desarrollo anterior muestra como la gran complejidad de este tema viene marcada porque en cada momento histórico pueden convivir diversos modelos que corresponden a diversos marcos teóricos. Así, para el átomo, tenemos el modelo clásico de Rutherford, los precuánticos de Bohr y Sommerfeld y el cuántico de Schrödinger. En el enlace químico tenemos los modelos clásicos de iones para sólidos iónicos y metálicos (modelo del gas de electrones de Drude-Lorentz), el precuántico de Lewis para el enlace covalente (que se apoya en la estructura de capas de Bohr y Sommerfeld) y los cuánticos del EV, los OM o la teoría de bandas.

Esto pone de manifiesto como, a lo largo de la historia, la aceptación de algunas teorías ha significado una auténtica revolución en el pensamiento científico que ha requerido mucho tiempo, lo que puede explicar la gran dificultad del alumnado para la comprensión de estos conceptos. De ahí la necesidad de que la formación inicial y permanente del profesorado incluya aspectos históricos y epistemológicos de las ciencias (Mosquera y Furió, 2008).

A esto tenemos que añadir prerrequisitos importantes que facilitan la comprensión de los modelos atómicos y del enlace, en concreto de niveles energéticos, estabilidad de átomos y molé-

culas. Estos son la comprensión de la energía y de las cargas y de la interacción eléctrica entre ellas. Y, para más dificultad de los estudiantes, hemos encontrado en el análisis de textos de ESO y Bachillerato una mezcla de modelos en los átomos y en el enlace químico y que muchos textos presentan las aproximaciones de un modelo como descripción real y correcta, ignorando que todo modelo tiene sus limitaciones y que solo es útil si se es consciente de ellas (Silvestre et al. 2010).

Se olvida así el interés didáctico de la utilización de modelos. Según los estándares de la U.S. National Science Education (National Research Council, 1996), *“Los modelos son esquemas o estructuras provisionales que se corresponden con objetos reales, situaciones, o tipo de situaciones, con un poder explicador. Los modelos ayudan los científicos e ingenieros a entender como funcionan las cosas”*. Así que son utilizados como explicación de forma esquemática y sencilla de fenómenos que, otrosí, requerirían una descripción complicada. También se impide familiarizar los alumnos con los procedimientos de trabajo de los científicos, que elaboran modelos para explicar los problemas hasta que surgen dificultades que obligan a cambiarlos (Solbes, 1996). Los expertos reales son capaces de emplear diferentes modelos simultáneamente, reconociendo las virtudes y limitaciones de cada uno y aplicándolos adecuadamente (Ireson, 2000; Brookes y Etkina, 2007; Grosslight et al., 1991).

Para evitar la enseñanza de ideas erróneas algunos se manifiestan contra el uso del modelo de Bohr u otras

descripciones del átomo que incluyan órbitas (Fischler y Lichtfeldt, 1992). Por el contrario, Petri y Niedderer (1998) piensan que el modelo de Bohr constituye un paso necesario en el camino del aprendizaje del estudiante. Otros lo ven como un paso histórico importante por entender los átomos (Blanco y Níaz, 1998; Justi y Gilbert, 2000). Además, algunos aprecian el modelo de Bohr (Kalkanis et al. 2003; Solbes, 1996; Solbes y Sinarcas, 2010) como una herramienta útil para definir la visión cuántica de los átomos. Es decir, permite introducir de forma sencilla el concepto de estado, caracterizado por los valores definidos de unas magnitudes, la energía y el momento angular. Además, permite ver que estas magnitudes no pueden tomar todos los valores posibles, sino que están cuantificadas por un número cuántico (Solbes, 1996). Por otra parte, los alumnos, como resultado de las informaciones de los medios de comunicación, de la educación primaria, etc. poseen una representación atómica mediante órbitas, que proponemos explicitar para cambiarla seguidamente. En resumen, evitar el modelo de Bohr impediría salir al paso de la imagen del átomo que tiene el alumnado y privaría a éste de una herramienta que los científicos consideran útil.

En consecuencia, si se considera de interés didáctico la enseñanza de modelos de átomo y enlace convendría hacerlo de una manera secuenciada, siguiendo el desarrollo histórico y no presentándolos todos en todos los cursos. Así, el modelo clásico (Rutherford e iones) debería utilizarse en 3º de ESO, el precuántico (Bohr y Lewis) en 4º de

ESO (que recordemos es optativo) y 1º de Bachillerato y el cuántico en 2º de Bachillerato. Pero en cada curso convendría mostrar los límites tanto teóricos como experimentales del modelo utilizado (Solbes, 1996) y apuntar la existencia de un nuevo modelo, en el que se profundizará el curso siguiente.

Por otra parte, la presentación en los textos de los modelos de enlace impide una visión unitaria del enlace químico (Silvestre et al., 2010). Incluso, en libros de Química de 2º de Bachillerato, donde se introducen los orbitales atómicos y se habla de la superposición de los mismos para explicar el enlace, se intenta, a su vez, mantener el modelo de Lewis, a pesar de sus limitaciones con hipótesis *ad hoc* (resonancia, teoría de repulsión de pares electrónicos de la capa de valencia, TRPECV), como se hizo con el modelo geocéntrico (epiciclos). El tratamiento cuántico del enlace favorecería una visión unitaria del mismo, aunque dicho tratamiento, que si se hacía en COU, parece transferirse a la Química universitaria actualmente. Aún así, se podría mostrar una visión unitaria del enlace en la Química de Bachillerato a partir del enlace covalente. Cuando este se produce entre átomos idénticos, la distribución de probabilidad de los electrones de valencia se encuentra muy localizada en la región internuclear. En los enlaces covalentes entre átomos diferentes, dicha distribución se encuentra desplazada hacia el átomo más electronegativo (originando moléculas polares), siendo en los sólidos iónicos tan grande ese desplazamiento, que es una aproximación razonable considerarlos constituidos por iones. Por otra

parte, en moléculas como el benceno o el butadieno, no se puede hablar de enlaces dobles, sino de un enlace covalente deslocalizado. En el caso extremo de los *metales* tenemos distribuciones de probabilidad que se extienden por todo el cristal, es decir, existencia de electrones deslocalizados, que explican su elevada conductividad eléctrica y térmica. En la ESO, la visión unitaria se podría basar en el carácter eléctrico de las interacciones entre átomos.

Por último, y no menos importante, dado el desinterés por los estudios de física y química que se detecta en el alumnado (Solbes et al., 2007) se utilizará la historia de la ciencia en la propuesta para los estudiantes porque la investigación didáctica ha puesto de manifiesto su carácter motivador (Izquierdo, 1994; Matthews, 1994). En particular, se ha comprobado que extraer de la historia los problemas significativos, evitar visiones dogmáticas, mostrar la dimensión humana y la naturaleza colectiva y controvertida de la investigación científica y de una historia contextualizada que muestre las relaciones de la ciencia con la tecnología y la sociedad produce actitudes positivas en el alumnado (Solbes y Traver, 2001).

### Referencias bibliográficas

- ASIMOV, ISAAC (1999), *Breve historia de la química*, Madrid: Alianza Editorial.
- ATKINS, P. W. (1985). *Fisicoquímica*. México: Fondo Educativo Interamericano.
- BENSAUDE-VINCENT, B i STENGERS, I. (1998). *Historia de la Química*. Madrid: Wesley Addison, U.A.M.
- BLANCO, R. & NÍAZ, M. (1998). Baroque tower on a gothic base: A lakatosian reconstruction of students' and teachers' understanding of structure of the atom, *Science Education*. 7, 327-360.
- BROOKES, D. T. & ETKINA, E. (2007). Using conceptual metaphor and functional grammar to explore how language used in physics affects student learning, *Physical Review Special Topics - Physics Education Research* 3, 010105-1 – 010105-16.
- BUTLER, C., DAVIES, B. JACQUIER, M. & McCARTHY (Ed). (1972). *The concept of the atom*. Heineman Educational. Victoria.
- CENTELLAS, F., BRILLAS, E., DOMÈNECH, X. y BASTIDA, R. M. (1992). *Fonaments d'estructura atòmica i enllaç químic*. Barcelona: Universitat de Barcelona i Barcelona.
- DE LA SELVA, T (1993). *De la alquimia a la química*. Ciudad de México, Fondo de Cultura Económica. Disponible en: <http://omega.ilce.edu.mx:3000/sites/ciencia/html/quimica.html>.
- DELGADO, R (2004). *Historia de la Química*. Cuba. Editorial Rolando.
- FISCHLER, H. & LICHTFELD, M. (1992). Modern physics and students conceptions, *Internacional Journal of Science. Education*. 14 (2), 181-190

- GRIBBIN, JOHN (2003) *Historia de la ciencia (1543-2001)*. Madrid, Editorial Crítica.
- GROSSLIGHT, L. et. al. (1991). Understanding models and their use in science: Conceptions of middle and high school students and experts, *Journal of Research in Science Teaching*. 28, 799-822.
- HARRISON, A. G. & TREAGUST, D.F. (2002). Teaching quantum mechanics on an introductory level, *American Journal of Physics*. 70, 200-209.
- IRESON, G. (2000). The quantum understanding of pre-university physics students. *Physics Education*. 35, 15-21.
- IZQUIERDO, M. (1994). Cómo contribuye la historia de las ciencias en las actitudes del alumnado hacia la enseñanza de las ciencias. *Aula de Innovación Educativa*, 27, 37-41.
- JAFFE, B. (1964). *La química crea un mundo nuevo*. Buenos Aires, Eudeba.
- JUSTI, R. & GILBERT, J. (2000). History and philosophy of science through models: Some challenges in the case of "the atom", *International Journal of Science Education*. 22 (9), 993-1009.
- KALKANIS, G., HADZIDAKI, P. & STAVROU, D. (2003). An instructional model for a radical conceptual change towards quantum mechanics concepts. *Science Education*. 87 (2), 257-280.
- KRAGH, E. (2007). *Generaciones Cuánticas*. Tres Cantos: Akal.
- MASON, S. F. (1986), *Historia de las ciencias, vol 5. La ciencia del siglo XX*, Madrid: Alianza.
- MATTHEWS, M. R. (1994). Historia, filosofía y enseñanza de las ciencias: la aproximación actual. *Enseñanza de las Ciencias*, 12 (2), 255-277.
- MOSQUERA, J. C. y FURIÓ, C. (2008). El cambio didáctico en profesores universitarios de física a través de un programa de actividades basado en la enseñanza por investigación orientada. *Didáctica de las Ciencias Experimentales y Sociales*. 22, 115-154.
- NATIONAL RESEARCH COUNCIL, (1996). *National Science Education Standards* National Academy, Washington, DC,
- NAVARRO, J. (2009). *Una ecuación y un gato. Schrödinger*. Nivola, Tres Cantos
- PETRI, J. & NIEDDERER, H. (1998). A learning pathway in high-school level quantum atomic physics, *International Journal of Science and Education*. 20 (9), 1075-1088.
- PIMENTEL, G. C. (1994). *Oportunidades en la Química. Presente y futuro*, México: McGraw Hill.
- SÁNCHEZ RON, J.M. (2007). *El poder de la ciencia*, Barcelona: Crítica.
- SILVESTRE, M., SOLBES, J. i FURIÓ, C. (2010). *Models atòmics i enllaç químic en l'ensenyament secundari*. Valencia: Servei de Publicacions de la Universitat de València.
- SOLBES, J. (1996). La física moderna y su enseñanza, *Alambique*. 10, 59-67.
- SOLBES, J., MONTSERRAT, R. y FURIÓ, C. (2007). El desinterés del

alumnado hacia el aprendizaje de la ciencia: implicaciones en su enseñanza. *Didáctica de las Ciencias Experimentales y Sociales*, 21, 91-117.

SOLBES, J. y SINARCAS, V. (2009). Utilizando la historia de la ciencia en la enseñanza de los conceptos claves de la física cuántica. *Didáctica de las Ciencias Experimentales y Sociales*. 23, 123-151.

SOLBES, J. y TRAVER, M. (2001). Resultados obtenidos introduciendo la historia de la ciencia en las clases de física y química: mejora de la imagen de la ciencia y desarrollo de actitudes positivas, *Enseñanza de las ciencias*, 19 (1), 151-162.

TATON, R. (Ed) (1973). *La ciencia contemporánea (s XX)*, Barcelona: Destino.