

Enlace químico y estructura: construcción de modelos y explicaciones a partir de datos experimentales

Enllaç químic i estructura: construcció de models i explicacions a partir de dades experimentals

Chemical bonding and structure: building models and explanations from experimental data

Vicente Talanquer / Universidad de Arizona. Departamento de Química y Bioquímica (EUA)



resumen

Reformas educativas en la enseñanza de las ciencias en todos los niveles educativos en los últimos treinta años han enfatizado la necesidad de involucrar a los estudiantes de manera más activa en la construcción de su propio conocimiento. En particular, se espera que los estudiantes no solo adquieran conocimientos fundamentales, sino también que comprendan cómo tales conocimientos se generan a partir de observaciones y mediciones. En esta contribución se describe una secuencia de actividades guiada por esta filosofía educativa e implementada en un curso de química general a nivel universitario.

palabras clave

Enlace químico, enseñanza, prácticas científicas, química general.

resum

Reformes educatives en l'ensenyament de les ciències a tots els àmbits educatius en els últims trenta anys han posat l'èmfasi en la necessitat d'involucrar els estudiants d'una manera més activa en la construcció del coneixement propi. En particular, s'espera que els estudiants no només adquireixin coneixements fonamentals, sinó també que compreguin com aquests coneixements es generen a partir d'observacions i mesures. En aquesta contribució es descriu una seqüència d'activitats guiada per aquesta filosofia educativa i implementada en un curs de química general en l'àmbit universitari.

paraules clau

Enllaç químic, ensenyament, pràctiques científiques, química general.

abstract

Reform efforts in science education at all educational levels in the last thirty years have emphasized the need for more actively engaging students in the construction of their own understandings. In particular, it is expected that students will not only acquire fundamental knowledge, but also learn how such knowledge is developed from observations and measurements. In this contribution we describe a set of activities guided by this educational philosophy and implemented in a general chemistry course at the college level.

keywords

Chemical bonding, teaching, scientific practices, general chemistry.

Introducción

Las llamadas a transformar la enseñanza de las ciencias en los últimos años enfatizan la necesidad de crear más oportunidades para que los estudiantes se involucren de manera activa en la generación de explicaciones y argumentos sobre problemas relevantes (National Research Council, 2011). Se espera que los alumnos desarrollen la capacidad para analizar datos, identificar regularidades y crear o utilizar modelos para dar sentido a observaciones sobre las propiedades y el comportamiento de sistemas de interés. El objetivo no es que los estudiantes «descubran» por sí solos las leyes y principios de la química u otras ciencias, sino que comprendan y ganen experiencia en la aplicación de prácticas científicas, al mismo tiempo que desarrollan sus conocimientos sobre conceptos e ideas centrales en cada disciplina.

Convencidos de los beneficios de involucrar a los estudiantes de manera más activa en la construcción de ideas en clase, en los últimos ocho años hemos trabajado en la transformación del curso introductorio de química general en la Universidad de Arizona. La filosofía general de nuestra reforma educativa se centra en ayudar a los estudiantes a desarrollar formas de «pensamiento químico» que son de gran utilidad en el análisis y la resolución de problemas en diversas áreas, desde la contaminación ambiental hasta el desarrollo de fuentes alternativas de energía (Talanquer y Pollard, 2010; Talanquer, 2014). Como parte del proceso de reforma, hemos generado diversas unidades didácticas centradas en la construcción de conceptos centrales en química a partir del análisis de datos experimentales sobre los siste-

Un objetivo central de los cursos introductorios de química es que los estudiantes aprendan a relacionar las propiedades físicas y químicas de las sustancias con su estructura a nivel submicroscópico

mas de interés. En particular, en esta contribución se describe la secuencia de actividades que utilizamos para ayudar a los estudiantes a dar respuesta a una pregunta esencial en química: ¿por qué se forman enlaces químicos entre átomos?

Las actividades que se presentan en este artículo ilustran nuestro método de trabajo en clase con más de doscientos alumnos. Estos alumnos trabajan frecuentemente en grupos de dos o tres personas, bajo la guía y con el apoyo de un instructor principal y varios estudiantes asistentes.

¿Por qué se forman enlaces químicos entre átomos?

Un objetivo central de los cursos introductorios de química es que los estudiantes aprendan a relacionar las propiedades físicas y químicas de las sustancias con su estructura a nivel submicroscópico. Esta tarea demanda que los estudiantes comprendan cómo y por qué se forman enlaces químicos entre los diversos tipos de átomos que componen una sustancia. En particular, en nuestro curso de química general, nos interesa que los estudiantes reconozcan que, cuando dos o más átomos interactúan, comúnmente se producen redistribuciones electrónicas que reducen la energía total de los átomos en interacción. Cuando esto pasa, decimos que la formación de enlaces da lugar a siste-

mas más estables, pues se requiere invertir energía para separar los átomos que los componen. El tipo de redistribución electrónica que se produce depende de la naturaleza de los átomos involucrados y determina el tipo de enlace que se forma entre ellos.

Análisis de datos

Dado nuestro interés en que los estudiantes reconozcan los cambios energéticos asociados a la formación de enlaces químicos, el trabajo en el aula se centra en ayudar a los estudiantes a desarrollar modelos sobre la distribución de los electrones en distintos niveles energéticos en diversos átomos y moléculas. Para ello utilizamos datos experimentales generados por espectroscopia fotoelectrónica (Gillespie, Spencer y Moog, 1996a). Esta técnica de análisis se basa en la extracción de electrones de los átomos o moléculas de interés haciendo uso de radiación electromagnética de alta energía (rayos X). La diferencia entre la energía de la radiación incidente y la energía cinética de los electrones removidos es una medida de la energía requerida para ionizar los diferentes electrones presentes en el sistema. Los resultados experimentales pueden representarse en espectros como los ilustrados en la fig. 1 para los átomos de hidrógeno, flúor y sodio. Estos espectros incluyen información sobre la energía

El trabajo en el aula se centra en ayudar a los estudiantes a desarrollar modelos sobre la distribución de los electrones en distintos niveles energéticos en diversos átomos y moléculas

Nos interesa que los estudiantes comparen y contrasten los espectros de diferentes átomos para identificar similitudes y diferencias, así como regularidades en la estructura de los espectros en función del número atómico

necesaria para ionizar distintos grupos de electrones (eje de las abscisas) y sobre el número de electrones en cada grupo (eje de las ordenadas). Para facilitar el trabajo de los estudiantes, hemos construido una herramienta computacional interactiva que les permite desplegar el espectro fotoelectrónico de diversos átomos y moléculas de forma individual o por pares

(Talanquer, 2009). Esta herramienta está disponible en la siguiente página web: <https://sites.google.com/site/ctinteractivas/atomic-structure> (seleccione «Photoelectron Spectra»).

La primera tarea de los estudiantes es analizar varios de estos espectros y discutir en pequeños grupos la información que nos proporcionan. En particular, nos interesa que los estudiantes comparen y contrasten los espectros de diferentes átomos para identificar similitudes y diferencias, así como regularidades en la estructura de los espectros en función del número atómico. Por ejemplo, se espera que los estudiantes reconozcan la presencia, en cada tipo de átomo, de grupos de electrones con la misma energía de ionización; la presencia de números característicos de electrones (2, 6, 10) en cada uno de estos grupos; la existencia de grupos de electrones equivalentes en distintos tipos de átomos, y la relación entre número atómico y energías de ionización en grupos equivalentes de electrones en distintos átomos.

Construcción de modelos

El análisis de los espectros de espectroscopia fotoelectrónica se utiliza para crear la necesidad de generar explicaciones sobre las similitudes, diferencias y regularidades observadas. Estas explicaciones demandan la construcción de modelos sobre la distribución de electrones en cada tipo de átomo. Con este fin, solicitamos a los estudiantes que colaboren en la elaboración de dibujos y diagramas que representen la distribución de los electrones en un átomo de manera que sean consistentes con los resultados experimentales. Estos dibujos y diagramas deben representar tanto la distribución de los electrones en el espacio como en distintos niveles de energía. Si es

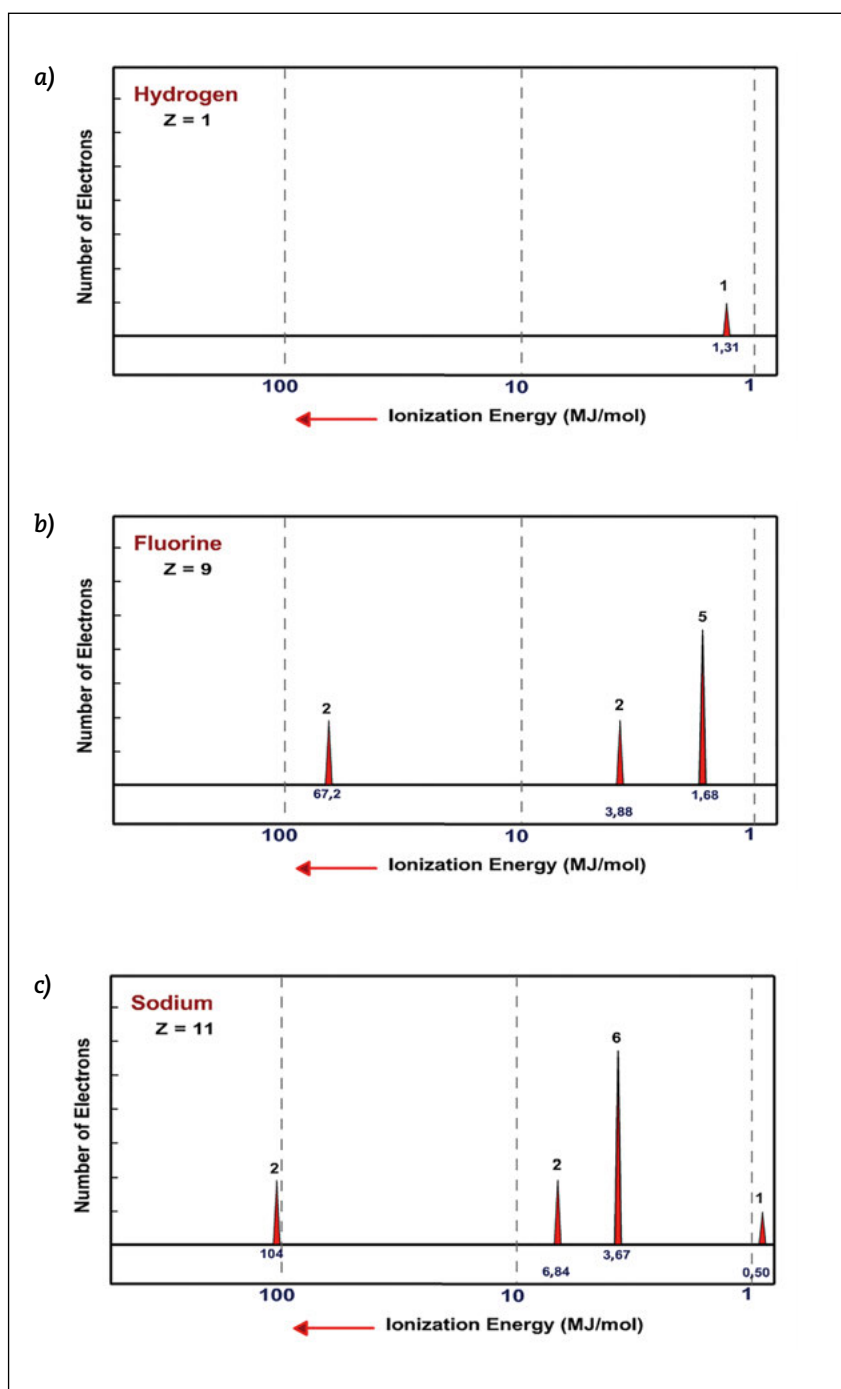


Figura 1. Espectros fotoelectrónicos de los átomos de: a) hidrógeno, b) flúor y c) sodio.

necesario, construimos de forma colectiva estas representaciones para un tipo de átomo (fig. 2) y, después, pedimos a los estudiantes que extiendan estas ideas a otros sistemas.

difícil entender la relación entre energía potencial de los electrones y su energía de ionización: cuanto menor sea el valor de la energía potencial (más negativo), mayor será la energía de ioniza-

relativa de partículas en interacción y cambios en la energía potencial y cinética de sistemas atómicos.

Generación de explicaciones y predicciones

Una vez que los estudiantes generan diagramas energéticos correspondientes a distintos tipos de átomos, su trabajo se dirige a la comparación y contrastación de estas representaciones con el fin de identificar diferencias, similitudes y regularidades en su estructura. En un principio, este análisis se realiza de forma cualitativa (fig. 3). Nuestro objetivo es que los estudiantes reconozcan que los datos experimentales pueden explicarse si asumimos que:

- los electrones en cada átomo ocupan niveles de energía con valores específicos;
- no todos los electrones ocupan el mismo nivel de energía;
- existe un número máximo de electrones en cada nivel de energía, y
- la distribución de niveles de energía es similar para los distintos átomos, aunque los valores de la energía asociada con cada nivel dependen del número atómico. Los estudiantes también pueden

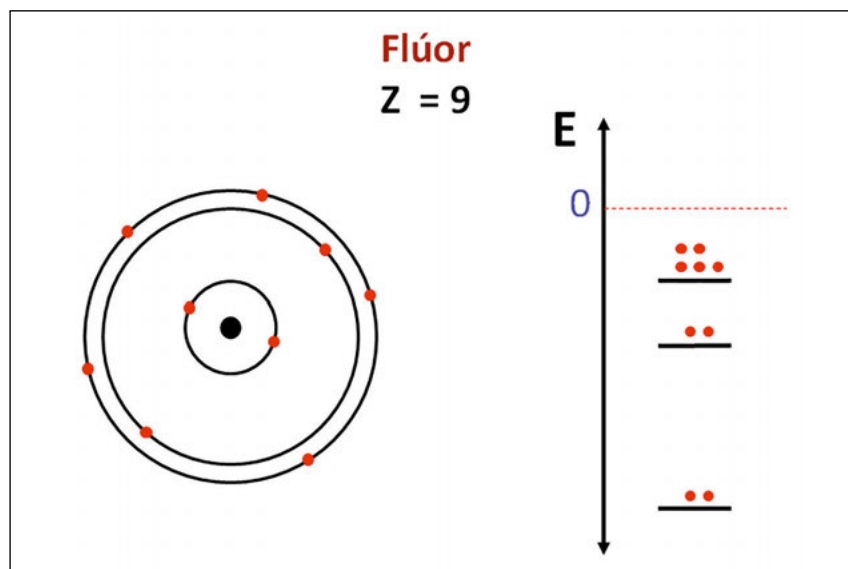


Figura 2. Dibujos y diagramas que ilustran una posible distribución espacial y en niveles energéticos de electrones en un átomo de flúor consistente con el espectro fotoelectrónico.

Durante la construcción y representación de los modelos, se espera que los estudiantes reconozcan y comprendan las relaciones entre energía de ionización, fuerza de atracción entre protones y electrones en un átomo y energía potencial de este sistema de partículas. En general, la mayoría de nuestros estudiantes asocia con facilidad la energía de ionización con la distancia relativa entre diferentes grupos de electrones y el núcleo atómico (a mayor distancia, menor fuerza de atracción y menor energía de ionización). Esto les facilita la construcción de diagramas tipo «átomo de Bohr», que ilustran distribuciones electrónicas espaciales consistentes con los datos experimentales (fig. 2). Sin embargo, un gran número de alumnos tiene dificultades para generar los diagramas energéticos correspondientes. Les resulta particularmente

Es por ello que gran parte de nuestro trabajo en esta etapa se centra en ayudar a los estudiantes a entender de manera significativa el concepto *energía potencial*, así como la relación entre cambios en la posición

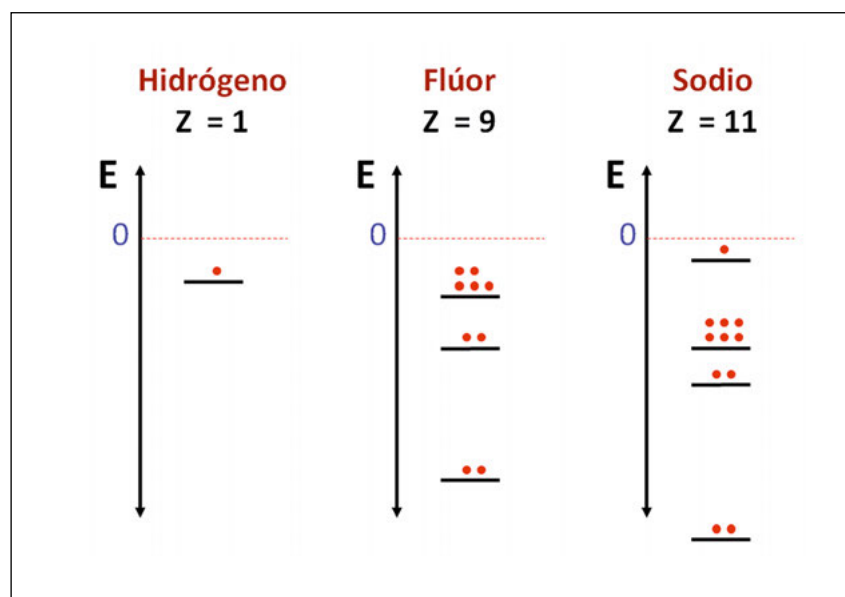


Figura 3. Diagramas energéticos cualitativos para los átomos de hidrógeno, flúor y sodio.

notar que los electrones de valencia en átomos metálicos tienden a ocupar niveles energéticos con mayor energía que los electrones de valencia en átomos no metálicos.

Dado nuestro interés en ayudar a los estudiantes a generar y utilizar modelos para generar explicaciones y hacer predicciones, el trabajo en el aula constantemente se dirige a esta meta. Por ejemplo, el análisis de los diagramas espaciales y energéticos abre la puerta a plantear una pregunta central en la comprensión de cómo y por qué se forman enlaces entre átomos: ¿cómo esperamos que los niveles energéticos y la distribución de electrones se modifiquen cuando dos átomos entren en interacción? Antes de presentar los datos experimentales que permiten dar respuesta a esta pregunta, solicitamos a los estudiantes que hagan predicciones y las justifiquen con base en sus modelos y conocimientos sobre los efectos de interacciones entre electrones y protones. Esta actividad nos permite evaluar la comprensión de los estudiantes y clarificar conceptos e ideas, si es necesario.

Evaluación de predicciones

Con el fin de verificar sus predicciones acerca de los efectos de interacciones atómicas sobre la distribución de electrones, los estudiantes analizan los espectros fotoelectrónicos de dos moléculas distintas: H_2 y HF. Este análisis se hace de manera gradual, comenzando por la molécula de hidrógeno (fig. 4a). Como se hizo con anterioridad, el trabajo de análisis implica generar diagramas espaciales y energéticos que sean compatibles con los datos experimentales, y comparar y contrastar dichas representaciones con las de los átomos individuales (fig. 5). Este análisis revela que la formación

Con el fin de verificar sus predicciones acerca de los efectos de interacciones atómicas sobre la distribución de

electrones, los estudiantes analizan los espectros fotoelectrónicos de dos moléculas distintas: H_2 y HF

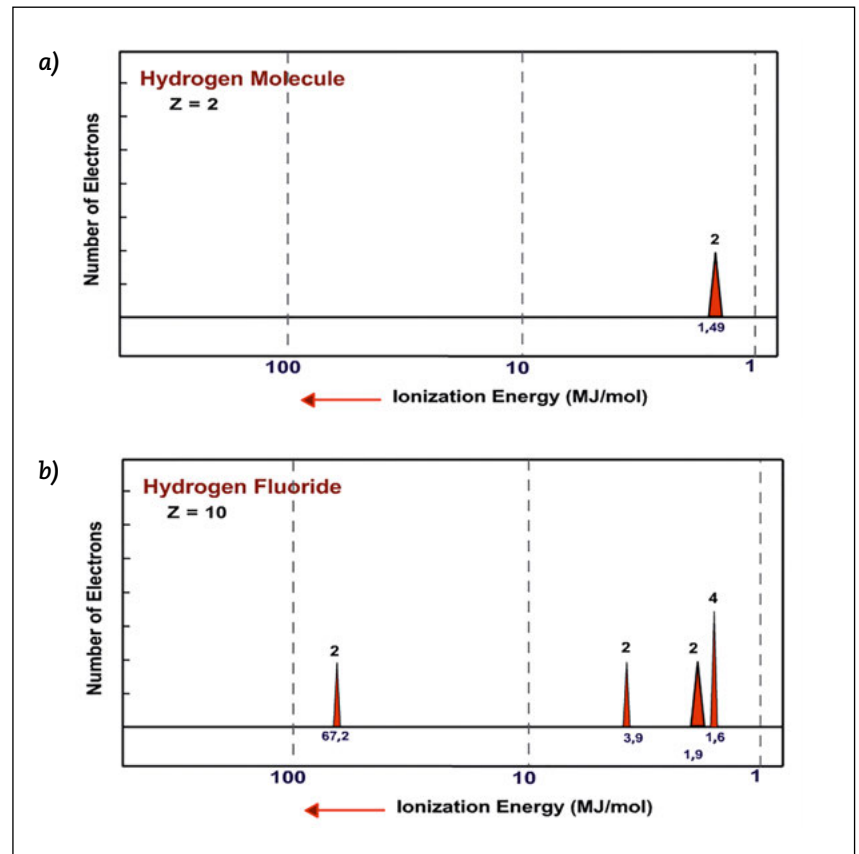


Figura 4. Espectro fotoelectrónico de la molécula de: a) hidrógeno y b) fluoruro de hidrógeno.

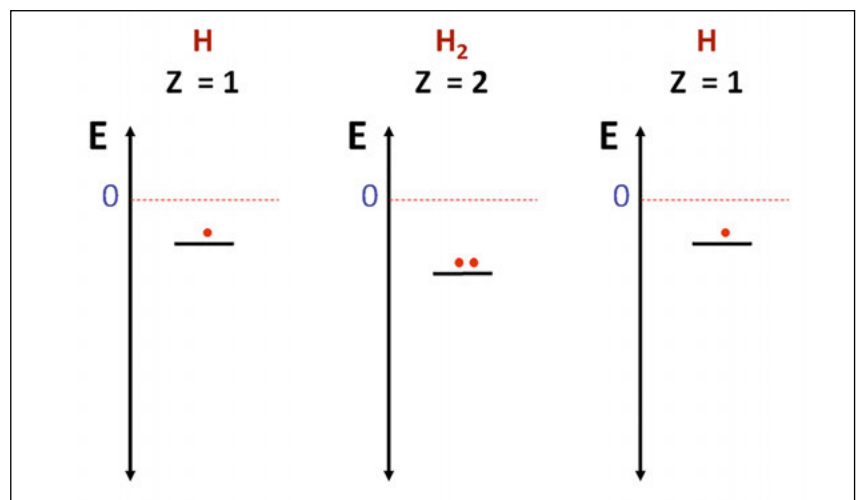


Figura 5. Diagramas energéticos cualitativos correspondientes a dos átomos de hidrógeno (H) individuales y a la molécula de hidrógeno (H_2).

de un enlace viene acompañada por la redistribución de un par de

electrones de valencia en niveles con menor energía que los que

ocupaban en los átomos individuales. Como resultado de esta redistribución, la energía total del sistema disminuye. Este fenómeno se verifica a través de la comparación de los espectros fotoelectrónicos de los átomos de hidrógeno (fig. 1a) y flúor (fig. 1b) con el de la molécula de fluoruro de hidrógeno (fig. 4b).

Extensiones

El trabajo descrito en las secciones anteriores puede completarse en tres o cuatro horas de trabajo en el aula. Sin embargo, el análisis y las discusiones de los estudiantes pueden ser extendidos y enriquecidos en varias direcciones. Por ejemplo, los datos experimentales contenidos en los espectros fotoelectrónicos de átomos y moléculas pueden utilizarse para cuantificar la energía de ionización promedio de los electrones de valencia en cada tipo de sistema. Esta energía de ionización promedio $\langle EI \rangle$ se define de la siguiente manera (Gillespie, Spencer y Moog, 1996b):

$$\langle EI \rangle = \frac{aEI_a + bEI_b}{a + b}$$

donde a y b son los números de electrones en cada nivel de valencia, y EI_a y EI_b son las energías de ionización correspondientes a los electrones en dichos niveles. A continuación se muestran los resultados cuando esta relación se aplica a los datos representados en la fig. 1 para los átomos de hidrógeno (H), flúor (F) y sodio (Na):

$$\langle EI(H) \rangle = \frac{1 \times 1,31}{1} = 1,31 \frac{MJ}{mol} \quad \langle EI(F) \rangle = \frac{2 \times 3,88 + 5 \times 1,68}{7} = 2,31 \frac{MJ}{mol}$$

$$\langle EI(Na) \rangle = \frac{1 \times 0,5}{1} = 0,5 \frac{MJ}{mol}$$

Estos números son una medida de la fuerza de atracción

La información contenida en los espectros fotoelectrónicos de átomos y moléculas también puede utilizarse para introducir el concepto *energía de enlace* y realizar estimaciones de su valor para un par de moléculas

entre los electrones de valencia y los protones en el núcleo de cada átomo. Estas cantidades son, de hecho, una medida indirecta de la electronegatividad de cada tipo de átomo, por lo que su cálculo en el aula también puede utilizarse para introducir este concepto a partir del análisis de datos experimentales. Haciendo uso de los diagramas energéticos contruidos por los alumnos, la diferencia de electronegatividades entre dos átomos puede relacionarse con la diferencia en el promedio de la energía potencial de sus electrones de valencia. De esta manera, lo que tradicionalmente se presenta como una «tendencia» de los electrones en un enlace a desplazarse en la dirección del átomo más electronegativo puede explicarse en términos de redistribución de electrones desde estados de alta energía potencial a estados de menor energía potencial.

La información contenida en los espectros fotoelectrónicos de átomos y moléculas también puede utilizarse para introducir el concepto *energía de enlace* y realizar estimaciones de su valor

para un par de moléculas. La magnitud de la energía de enlace

debe ser cercana a la disminución en la energía de los electrones cuando el enlace se forma (o a la energía requerida para separar los átomos y retornar los electrones a sus niveles energéticos originales). Por ejemplo, los datos contenidos en la fig. 1a para el átomo de hidrógeno y en la fig. 4a para la molécula de hidrógeno sugieren que la formación de una molécula de H_2 causa una disminución en la energía potencial de cada electrón igual a la diferencia en energías de ionización: $(1,31 - 1,49) \text{ MJ/mol} = -0,18 \text{ MJ/mol}$. La energía de enlace puede entonces estimarse como $2 \times 0,18 \text{ MJ/mol} = 360 \text{ kJ/mol}$. Aunque este número difiere del valor experimental (432 kJ/mol), su cálculo y las discusiones asociadas a él ayudan a los estudiantes a comprender de mejor modo el concepto *energía de enlace* y a relacionarlo con cambios en la distribución de electrones en un sistema. Este análisis también hace patente que la formación de enlaces resulta en la disminución de energía total de los átomos involucrados e involucra, por tanto, una transferencia de energía desde el sistema hacia sus alrededores (proceso exotérmico). Varias investigaciones sobre concepciones alternativas en la enseñanza de la química han demostrado la gran dificultad que los estudiantes tienen para comprender la relación entre enlace químico y energía (Kind, 2004). Nuestro método de trabajo ha ayudado a reducir la incidencia de este tipo de problemas conceptuales entre nuestros alumnos.

Comentarios finales

La secuencia de actividades descrita en la sección anterior representa un ejemplo de cómo podemos ayudar a los estudiantes a construir conceptos e ideas centrales en química con base en el análisis de datos experimentales y en la generación de modelos

para explicarlos. Esta forma de involucrar a los estudiantes en la construcción de conocimientos puede utilizarse en el estudio de una gran variedad de temas presentes en los currículos tradicionales de química a nivel universitario y preuniversitario. Por ejemplo, nosotros usamos este abordaje en la discusión y el análisis de las propiedades físicas de compuestos moleculares y compuestos iónicos; en la caracterización de relaciones entre estructura y fuerza ácida, y en la caracterización de relaciones entre la estructura de reactivos y productos y la direccionalidad de las reacciones químicas. En todos estos casos, el análisis de datos permite identificar regularidades que pueden explicarse a través de la construcción de modelos sencillos de los sistemas de interés. Una vez que estos modelos se construyen, los utilizamos para realizar predicciones en otros contextos.

Este método de trabajo con los estudiantes tiene varias ventajas. Primero, ayuda a los alumnos a entender mejor las prácticas científicas y el proceso de generación de conocimientos en la disciplina bajo estudio. Segundo, involucra a los estudiantes de forma activa en la construcción de conceptos e ideas, haciendo más explícitas las conexiones entre las propiedades y fenómenos que observamos y los modelos y teorías que se generan para explicarlos. Tercero, el proceso de construcción de conocimientos fortalece la habilidad de los estudiantes para generar explicaciones mecanísticas de sistemas y procesos químicos, esto es, explicaciones basadas en el análisis de las interacciones entre partículas en un sistema y sus efectos en la distribución espacial y energética de sus componentes. Estas explicaciones mecanísticas contrastan con las explicaciones

teleológicas que muchos estudiantes generan tras ser expuestos a la enseñanza tradicional sobre el enlace químico. Las explicaciones teleológicas atribuyen propósitos al comportamiento de los átomos, considerando que estas partículas forman enlaces porque quieren alcanzar un estado más deseable (Talanquer, 2013).

Desde la perspectiva docente, la enseñanza centrada en el análisis de datos, la generación de modelos y la construcción de explicaciones y argumentos crea múltiples oportunidades para evaluar formativamente el conocimiento de los estudiantes y proporcionarles apoyo de manera más efectiva. En este método de trabajo, los estudiantes expresan sus ideas públicamente, ya sea en pequeños grupos; en forma de dibujos, diagramas y esquemas que comparten con el maestro y con otros compañeros, o en discusiones generales que involucran a toda la clase. Estas representaciones públicas de ideas permiten desarrollar una mejor comprensión de las dificultades de aprendizaje con que se enfrentan los alumnos y abren la puerta a la retroalimentación constante de manera individual o colectiva. Este método de trabajo no solo ha incrementado la motivación de los estudiantes en nuestros cursos de química general, sino también los conocimientos que demuestran en exámenes finales estandarizados.

Referencias

- GILLESPIE, R. J.; SPENCER, J. N.; MOOG, R. S. (1996a). «Demystifying introductory chemistry: electron configurations from experiment». *Journal of Chemical Education*, n.º 73, p. 617-622.
- (1996b). «Demystifying introductory chemistry: ionization energies, electronegativity, polar bonds and partial changes». *Journal of Chemical Education*, n.º 73, p. 627-631.

- KIND, V. (2004). *Beyond appearances: Students' misconceptions about basic chemical ideas*. 2.ª ed. Londres: Royal Society of Chemistry. También disponible en línea en: <http://www.rsc.org/images/Misconceptions_update_tcm18-188603.pdf> [Consulta: setembre 2015]
- NATIONAL RESEARCH COUNCIL (2011). *A framework for K-12 science education: Practices, crosscutting concepts, and core ideas*. Washington: The National Academies Press.
- TALANQUER, V. (2009). «Construyendo puentes conceptuales entre las varias escalas y dimensiones de los modelos químicos». *Educació Química EduQ*, n.º 5, p. 11-17.
- (2013). «When atoms want». *Journal of Chemical Education*, n.º 90, p. 1419-1423.
- (2014). «Desarrollando pensamiento químico en contextos sociales y ambientales». *Educació Química EduQ*, n.º 17, p. 4-11.
- TALANQUER, V.; POLLARD, J. (2010). «Let's teach how we think instead of what we know». *Chemistry Education Research and Practice*, n.º 11, p. 74-83.



Vicente Talanquer

Es profesor en la Universidad de Arizona. Autor o coautor de más de diez libros de texto para primaria y secundaria y de más de noventa artículos arbitrados de investigación en educación química y pensamiento docente. Su trabajo de investigación se centra en el estudio de las formas de razonamiento de los estudiantes y profesores de química.
C. e.: vicente@email.arizona.edu.