

LA ENSEÑANZA DE LA ESTRUCTURA DE LOS ÁTOMOS Y DE LAS MOLÉCULAS

José Luis Villaveces Cardoso
Grupo de Química Teórica, Universidad Nacional de Colombia.
e-mail:villacec@andinet.com

Abstract

Atomic and molecular structure and chemical bonding are three fundamental concepts in contemporaneous Chemistry that are incorrectly taught to high school students. Even though they have been developed throughout the last seventy years as mathematical objects with a precise elaboration that is still an active subject of research, high school students are presented with a coarse ersatz, full of reminiscences of the mechanicistic times enriched with magical numbers and ad-hoc postulates. It is needed to carry on urgently pedagogical research involving teachers and chemists, in order to develop ways of teaching these concepts to Colombian youngsters in an appropriate way to their age, but corresponding nearly to the models constituting today the strong nucleus of Chemistry and not the coarse metaphors that only increase the cleavage between the possibility of Colombians to be masters of their future and those of other countries that have appropriated knowledge. The main obstacle for this task is the fear of quantum theory that dominates our teachers, totally unjustified and having as its cause their ignorance of it. But ignorance is not a valid cause for sloppiness nor there is a valid reason to remain ignorant. In the National University of Colombia we have investigated this pedagogical problem for years and we have been successful in teaching rigorously contemporaneous concepts of Chemistry to students just beginning their studies and 135 hours later they are fluent in handling concepts and applications. There is no reason why those forming themselves to be teachers cannot learn appropriately since their first semesters the fundamental concepts of Chemistry and be prepared to teach them correctly afterwards.

RESUMEN

La estructura atómica, la estructura de las moléculas y el enlace químico son tres conceptos fundamentales de la química contemporánea que se enseñan muy mal a los estudiantes de bachillerato. A pesar de haber sido desarrollados en los últimos setenta años estos conceptos como objetos matemáticos con una elaboración precisa que aún es tema de investigación, los estudiantes de bachillerato son puestos frente a un sustituto burdo, plagado de reminiscencias de la época mecanicista, enriquecido con números mágicos y postulados *ad-hoc*. Es necesario adelantar urgentemente una investigación pedagógica entre docentes y químicos para construir formas de enseñanza en las que se presenten estos conceptos a los jóvenes colombianos en una forma adecuada a su edad pero correspondiente a los modelos que constituyen el núcleo fuerte de la química hoy en día y no a las torpes metáforas en boga entre nuestros maestros, que no hacen sino agravar la brecha entre las posibilidades que tendrán colombianas y colombianos de ser dueños de su futuro las que tienen otros países, dueños del conocimiento. El principal obstáculo para esta tarea proviene de un miedo a la teoría cuántica que domina a la mayoría de nuestros docentes, totalmente injustificado y que tiene como única causa la enorme ignorancia que tienen de ella. Pero ni la ignorancia es causa justa para la torpeza, ni hay razón valedera para mantenerse en ella. En la Universidad Nacional de Colombia llevamos años investigando en este problema pedagógico y tenemos resultados exitosos

en enseñar con rigor los conceptos contemporáneos de la química a estudiantes que ingresan a la universidad que 135 horas después manejan con fluidez conceptos y aplicaciones. No hay ninguna razón por la cual los estudiantes de licenciatura no puedan desde los primeros semestres aprender adecuadamente los conceptos fundamentales de la química y prepararse para enseñarlos bien después.

1. INTRODUCCIÓN: HAY UN PROBLEMA

Me preocupa la forma en que se enseña la estructura de los átomos y de las moléculas en Colombia, al terminarse el Siglo XX. Esta referencia espacio-temporal es importante. No se enseñaban así hace cincuenta años entre nosotros, ni se enseñan así en otros países.

La forma en que se enseñan entre nosotros hoy está marcada por varias causas, entre las cuales, sin duda, se destacan dos: la influencia de las Facultades de Educación y las Licenciaturas en Química y la influencia de los libros de texto que circulan corrientemente. No son las únicas causas. Cabe señalar que sobre el trasfondo común generado por estas dos se encuentran muchas diferencias. Diferencias que, en primer lugar, provienen de la natural heterogeneidad de las Facultades de Educación y de los libros de texto y, en segundo lugar, vienen del trabajo de grupos de docentes que han asumido el problema y han ido generando diversas maneras de entenderlo y desarrollarlo, con variados resultados y disímiles conclusiones.

No deja de ser notorio, sin embargo, que la Química parece ser, entre las ciencias básicas la que menos atrae el interés de quienes se preocupan por la epistemología, por la historia de la ciencia o por su enseñanza y son mucho más los grupos que encontramos trabajando en Física, Biología o Matemáticas. Esta actitud, sin duda, conduce a reforzar los problemas que existen, a disminuir la calidad e intensidad del debate y a perpetuar las actitudes problemáticas de quienes prefieren mantener esquemas tradicionales y evadir la crítica.

Aceptando que existe una abundancia de opiniones y métodos en cuanto a la forma de enseñar las teorías de la estructura atómica y molecular, cabe sin embargo la afirmación de que dentro de esta abundancia hay un denominador común que se hace evidente en los libros de texto y al cual responden generalmente los estudiantes que ingresan a la Universidad Nacional a estudiar la Carrera de Química. Este denominador común refleja graves problemas conceptuales y epistemológicos sobre los que hay que trabajar inmediatamente, tanto más cuanto que nuestra experiencia con estos 'primiparos es la que indica su existencia y nos hace pensar que, si esta pequeñísima minoría de jóvenes que decide hacer de la Química el centro de sus vidas presenta tantos problemas conceptuales, ¿cómo estarán todos los demás bachilleres?

2. AL COMENZAR EL SIGLO XX HUBO UNA REVOLUCIÓN CIENTÍFICA

Que al comenzar el Siglo XX hubo una revolución científica es una verdad bien sabida. Que esa revolución tuvo varios ingredientes, entre los cuales descuellan la Teoría de la Relatividad y la Mecánica Cuántica también se sabe bien. Se sabe que entre los móviles de la tal revolución descollaron las nuevas radiaciones, X , α , β , γ , y el desarrollo de las técnicas de análisis espectral. Se recuerda menos que el perfeccionamiento de la Tabla Periódica, la formulación de la teoría de Arrhenius de la ionización de las soluciones y el

descubrimiento de los gases nobles también fueron fundamentales en este proceso. Se conoce que esta revolución tuvo importantes consecuencias epistemológicas: dio al traste con las nociones viejas de causalidad y determinismo y puso coto al número de variables que se pueden medir simultáneamente o, mejor, a la precisión con que pueden ser medidas todas ellas en un estado dado de cualquier sistema físico. Dicho de manera más general, la imagen mecanicista del mundo, con masas puntuales que obedecen leyes newtonianas y se comportan como pelotillas y resortitos, construida pacientemente en los tres siglos anteriores mostró no ser más que una aproximación burda.

Hace cien años se entendió que había que cambiar nuestra concepción de la naturaleza y todo el Siglo XX estuvo consagrado a esa tarea. La cuántica pasó a ser la teoría fundamental y permitió el desarrollo de la microelectrónica y la óptica no lineal. La química estuvo profundamente ligada al nacimiento de las nuevas teorías. Fue en química que se plantearon los problemas fundamentales de estructura subatómica que condujeron primero al modelo atómico de Thomson y luego a la explicación de Bohr del espectro del átomo de hidrógeno. Fue la química la que planteó los problemas fundamentales de estructura de las moléculas que la mecánica cuántica primitiva no pudo resolver y estuvo, por lo tanto, entre las motivaciones que llevaron a la nueva formulación de la teoría cuántica entre 1925 y 1926. Fue el tratamiento de la molécula de hidrógeno hecho en 1927 por Heitler y London.

Uno de los principales logros de la nueva teoría y lo que hizo sentir a sus formadores que estaban en la vía correcta. Fue en la embriaguez causada por estos triunfos que Dirac proclamó que la química estaba resuelta y no era más que una aplicación de la mecánica cuántica.

Por eso es más que sorprendente que, habiendo estado tan ligada la química al nacimiento de la nueva concepción de la naturaleza, ochenta años después, cuando esta nueva concepción ha tenido tantos y tan importantes triunfos teóricos, empíricos, epistemológicos, prácticos, tecnológicos y económicos, habiéndose cambiado del todo gracias a ella, no sólo la imagen del mundo sino nuestra forma de hablar, de relacionarnos, de trabajar, de hacer las cosas y hasta de divertirnos, la química, o al menos los principales fundamentos de su cuerpo teórico: las teorías sobre la estructura de átomos y moléculas, se enseñen de una manera que en la mayoría de los casos es una mezcla fatal de nociones mal construidas, de fábulas sin sentido y de reminiscencias de la era mecanicista.

El futuro de Colombia está profundamente vinculado a la química. La agricultura depende cada vez más de la química y buena parte de la explicación de la improductividad de nuestro agro está ligada al bajo dominio de la química por parte de nuestra sociedad. El agricultor promedio no es interlocutor adecuado del fabricante de fertilizantes y el terror absurdo que nuestra sociedad ha generado contra los 'químicos' es una muestra de oscurantismo fundado en la ignorancia, que, frente a malos usos en algún momento, demoniza todo lo que le huele a química, sin entender que lo 'natural' es igualmente químico. La principal limitación ni siquiera viene de la improductividad del suelo, sino de la escasa agroindustria. Todo el procesamiento poscosecha está fundamentado en la química y nuestro país desaprovecha terriblemente todos los productos que podrían procesarse. La industria colombiana es de base química en un enorme porcentaje: petroquímica, metalúrgica, alimentos, textiles, son parte de los ejemplos. La enorme falta de cultura química de nuestra nación es un limitante absoluto al desarrollo y una de las razones importantes por las cuales nuestros industriales, nuestros cultivadores, nuestros agrónomos, nuestros comerciantes, nuestros banqueros, nuestros

dirigentes, no entienden que la química es fundamental para el desarrollo es porque guardan de ella el lejano recuerdo de las pesadillas que les causaban en el bachillerato esos crucigramas de “llenado de orbitales”, esos enlaces extraños en que las cargas de signo opuesto que debían repelerse, decidían aparearse, esos ochos mágicos, esos electrones orbitando como planetas y no logran entender cómo es posible que ese mundo de reglas extrañas tenga algo que ver con los problemas de la “vida real”. Probablemente tienen mucha razón. Eso no tiene nada que ver con la vida real, entre otras cosas, porque eso no es química y ningún químico o usuario de a química que se respete dedica mucho pensamiento a esos modelos fabulosos.

El problema es que multitud de actividades que tienen fundamento en la química se quedan sin una base teórica fuerte, sin modelos de calidad que sustenten su acción y su pensamiento y devienen recetas que dependen del desarrollo de destrezas o del aprendizaje de técnicas, pero no se logra la creatividad y la capacidad de innovación necesarias para que estas actividades sean verdaderamente relevantes en el mundo contemporáneo, moderno, tecnológicamente desarrollado y globalmente interconectado. En breve, sin un aparato teórico fuerte no podemos medrar en la “Sociedad del Conocimiento” que está a nuestras puertas.

No puede seguirse presentando al bachiller la química como una ciencia fundamentada en modelos de tan dudoso valor conceptual y epistemológico, y tan ajenos a la química de verdad, so pena de que nuestra nación se precipite a un desastre socio económico aun mayor que el que vivimos.

3. LA QUÍMICA ATRAPADA EN EL MECANICISMO BURDO

La relación entre la química y la ciencia de frontera del Siglo XX es estrechísima. ¿Cómo explicar entonces que sea precisamente la química la ciencia que se queda más fuertemente atrapada en la imagen mecanicista de los tres siglos anteriores?

Extrañamente, fue la aplicación de la teoría cuántica a la química lo que reforzó el modelo de la molécula como un objeto mecánico compuesto de bolitas y palitos, ensambladas como las piezas de un juego de “meccano”. Este modelo es muy generalizado y está dotado de gran poder heurístico, como fue mostrado, por ejemplo, por Watson y Crick cuando desarrollaron su interpretación de la Doble Hélice para la estructura del DNA, sin embargo, está lleno de problemas empíricos y conceptuales y no puede servir de base para una comprensión adecuada de la química contemporánea.

El problema esencial de este modelo está en que trata a los núcleos como a objetos clásicos, de formas y posiciones bien definidas, al mismo tiempo que trata a los electrones como objetos cuánticos, en una contradicción epistemológica total sobre la cual no se puede construir una teoría adecuada. Prácticamente todo libro de texto contemporáneo y seguramente la mayoría de los docentes llegan al punto en que consideran importante aclarar que los electrones no se comportan como partículas localizadas y por eso hay que hablar de “nubes” de electrones o de densidades de probabilidad de encontrarlos o alguna otra expresión que hable de la no localizabilidad de un electrón en un estado estable de un átomo o de una molécula¹. En cambio no se encuentra con frecuencia que los mismos libros de texto hablen de “nubes” de núcleos o de densidad de probabilidad de

¹ Y eso a pesar de que los mismos libros suelen presentar como verdad revelada el modelo planetario del átomo de Rutherford-Bohr en que los electrones son definitivamente pelotillas con posiciones y trayectorias bien definidas.

encontrarlos, sino que se trata a los núcleos como a objetos perfectamente clásicos, que no se enteraron de la revolución científica que se dio a principios de siglo.

¿Qué quiere decir esta discusión? ¿Por qué en un caso se habla de nubes y en el otro no? ¿En qué está lo incorrecto de este modelo mixto? No puede entenderse esto si no se ha trabajado en alguna medida con las teorías contemporáneas de los átomos y las moléculas. Desde simples analogías y metáforas que, además mezclan lo precuántico, lo clásico y lo cuántico lo único que puede darse es la impresión de que todo esto es un caos conceptual al cual la gente sensata no presta atención.

4. LA ESTRUCTURA ATÓMICA ES UN OBJETO MATEMÁTICO

La revolución de principios de siglo nos permitió tener un modelo claro y riguroso de átomo a partir de la teoría cuántica. Este modelo es un objeto matemático, no un artificio mecánico o pseudo mecánico. En él, se describe cada estado del átomo por una función que, en el caso del átomo de hidrógeno es bastante sencilla, una constante, un seno o un coseno. La mayor parte del conocimiento que tenemos sobre los átomos y muchas de las supersticiones sobre orbitales s, p, d, etc. que han plagado el siglo provienen de ahí.

Ernesto Sabato cuenta que alguien le pidió que le explicara la Teoría de la Relatividad. Muy animado empezó a hablar del espacio-tiempo, de las transformaciones de Lorentz, etc. Su interlocutor lo interrumpió, argumentando que no entendía. Entonces habló de la medida del tiempo, de la simultaneidad, del sentido de los relojes pero su interlocutor dijo que todavía no entendía. Entonces habló de un observador en un tren y de lo que veía en la estación y de lo que veía el de la estación y no escribió ninguna ecuación. Su interlocutor dijo que ahora sí entendía, entonces Sabato dijo ‘Sí, pero ahora ya no es la Relatividad’.

No es necesario enseñar la Relatividad en el colegio, pero entonces tampoco vale la pena hablar de observadores en los trenes y en las estaciones, en cambio, sí es necesario hablar de teoría atómica, de estructura molecular y de enlace químico.

La manera directa de hacerlo es plantear la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y contar cómo se resuelve. Luego, escribir algunas funciones para los niveles de energía más bajos y analizarlas detalladamente, extrayendo de ellas todo el sentido físico. Los estudiantes tal vez no entiendan. Se puede, en vez de eso, enunciar unas reglas sobre orbitales e imponer números mágicos para “llenarlos”. Los estudiantes tampoco entienden pero no se dan cuenta, pues al fin y al cabo no son malos para llenar crucigramas o acertijos de esta suerte. Creerán que “entienden” química pero ese conocimiento no les servirá en la vida para nada más que para aprobar exámenes de bachillerato. Otra posibilidad es dibujar-les sistemas planetarios o pudines de fresa. Entonces dirán que entienden, pero eso ya no tendrá nada que ver con la estructura atómica.

5. LA ESTRUCTURA MOLECULAR ES UN OBJETO MATEMÁTICO

Algo igualmente grave pasa con la estructura molecular. Los químicos orgánicos desarrollaron en la segunda mitad del Siglo XIX un hermoso cuerpo teórico basado en extraer propiedades de simetría de entre las reacciones químicas. Así, el problema planteado por el benceno era ¿cómo representar, con carbonos tetravalentes, un

compuesto de fórmula C_6H_6 , en que los seis hidrógenos se sustituían con facilidad por grupos monovalentes y todos los hidrógenos parecían equivalentes, pero si se sustituían dos hidrógenos simultáneamente, entonces había tres y solo tres resultados distintos. Kekulé vio que esto quería decir que el benceno tenía una simetría equivalente a la simetría de un hexágono regular, cuyos vértices pudieran ser marcados. Marcar uno sólo daba seis posibilidades equivalentes, pero marcar dos daba tres y sólo tres resultados distintos.

La idea es precisa: la simetría de los derivados del benceno es como la simetría de los vértices del hexágono. Esta es una metáfora del mismo tipo de la que podemos usar cuando hablamos de un triángulo amoroso.

A partir de la constatación del homeomorfismo, se pueden tomar dos caminos reconocer que esta propiedad nos abre el camino para una investigación de las propiedades matemáticas del problema, por ejemplo, ver si en el triángulo la distancia desde el vértice femenino hacia cada uno de los dos vértices masculinos (o del masculino hacia cada uno de los dos vértices femeninos, según sea el caso) es igual o hay una mayor que la otra. En este último caso, es previsible el desenlace. Evidentemente esto tiene sentido si se entiende "distancia" en un sentido abstracto, en este caso equivalente a atracción amorosa o algo así. El segundo camino es tomar una regla y medir cuanto hay físicamente de uno de los protagonistas al otro. Esta es una torpeza consistente en tomar la metáfora por una descripción física. No sólo extrae un resultado grosero a partir de una bella abstracción, sino que desaprovecha la riqueza conceptual presente en la metáfora.

5.1 Grafos y Moléculas

Con la estructura molecular se ha dado algo análogo. Por un lado, a partir del homeomorfismo constatado por Kekulé, se podía construir una teoría matemática de átomos, de vecinos cercanos y lejanos, entendida como relaciones abstractas. Esto fue lo que hicieron Cayley y Silvester y de allí nació la rama de la matemática conocida como Teoría de Grafos. Por otro lado se podía confundir la bella simetría del hexágono con un hexágono físico y creer que, efectivamente, en algún lugar del espacio hay hexagonitos sólidos. Esta torpeza es la que cometen a diario los libros de texto y la mayoría de los docentes y con ella dejan muy mal preparados a los estudiantes para entender el mundo en que viven.

6. LA ESTRUCTURA ATÓMICA Y MOLECULAR CONTEMPORÁNEA: UN PROBLEMA PEDAGÓGICO

Lo que he estado haciendo en los párrafos anteriores es dando argumentos para decir que no hay alternativa posible: si las teorías sobre la estructura atómica y molecular contemporáneas son teorías basadas en la Cuántica, que generan modelos matemáticos para estos conceptos fundamentales de la química, es necesario presentarlos como tales a los estudiantes. No hay derecho a que ochenta años después de realizados los principales avances en estos campos se mantenga a los colombianos ignorantes de ellos o se les den vulgares reemplazos llenos de inconsistencias y falsedades y, en todo caso, inútiles a la hora de fundamentar en ellos un verdadero conocimiento útil para la acción o para la comprensión del mundo contemporáneo.

Es decir, lo que hay que enseñar en el bachillerato es algo que permita entender que los átomos, electrones, núcleos y moléculas son objetos cuánticos, lo que eso implica y como a partir de allí se realizó el gran desarrollo científico tecnológico del Siglo XX.

No tengo una receta de cómo hacerlo, pero creo que es un problema que debe investigarse seriamente y debería estar en el centro de las preocupaciones pedagógicas de quienes se interesan por la enseñanza de la química.

Algunas veces he planteado esta situación ante grupos de docentes en actividad y entonces surge un problema importante: la mayoría ignoran por completo la Teoría Cuántica y quienes saben algo de ella se sienten completamente incómodos e incapaces de manejarla.

Así, si no tengo una receta pedagógica, sí tengo una primera afirmación tajante para avanzar hacia la solución del problema planteado: nadie puede enseñar lo que ignora por completo, por lo tanto la primera condición necesaria es que los docentes de química conozcan bien la teoría atómica y molecular basada en la Mecánica Cuántica y tengan habilidad operacional con ellas. Sólo quienes cumplan esta condición podrán adelantar investigaciones sobre la manera de enseñarlas en bachillerato. Quienes no conozcan bien las teorías contemporáneas sobre este tema deben abstenerse de hablar de ellas pues al hablar de lo que no conocen deforman horriblemente el conocimiento y lo sustituyen por fábulas y supersticiones.

Lo que estoy afirmando es que si deseamos que nuestro país pueda sobrevivir en el Siglo XXI, son indispensables dos condiciones: a) que en todas las facultades de educación del país se enseñe bien la teoría atómica y molecular contemporáneas para que los licenciados entiendan que los modelos corrientes de átomos y moléculas son objetos matemáticos y adquieran un buen uso operacional de ellos. b) que licenciados y otros profesionales bien formados de esta manera y conocedores de lo que están hablando desarrollen investigación juiciosa sobre la manera de enseñar estos temas en bachillerato, sin engañar a los estudiantes con burdos sustitutos.

7. LOS LOGROS EN LA QUÍMICA TEÓRICA DE LA U.N.

Si bien no tengo una fórmula para enseñarla en bachillerato, sí la tengo para enseñar la química cuántica a un buen nivel en la universidad, sin ningún requisito adicional.

En la Carrera de química de la Universidad Nacional llevamos ya casi diez años haciéndolo y el resultado ha sido suficientemente bueno como para que podamos replicar mucho de él. Dictamos en los tres primeros semestres de la carrera, es decir, comenzando con bachilleres que acaban de ingresar a la universidad un curso de 135 horas, organizado en tres semestres de tres horas semanales, que podría dictarse en menos tiempo, con más intensidad, y que lleva al bachiller a un conocimiento riguroso y a un dominio operativo de los conceptos básicos de la estructura del átomo, de la estructura de las moléculas y del enlace químico, en la forma en que son aceptados al terminar el Siglo XX. Al terminar el curso los estudiantes no sólo manejan la forma cuántica y matemática de estos conceptos, sino que son capaces de utilizar ágilmente los programas de química cuántica corrientes, como el Gaussian que le mereció el Premio Nobel a John Pople en 1998 o el Gamess, de libre distribución para PCs. Son varios los estudiantes que han podido desarrollar trabajos de investigación de nivel internacional publicables y

publicados en revistas internacionales de primera línea utilizando la química cuántica al nivel corriente hoy.

8. EL MIEDO A LA CUÁNTICA

Muchas veces he expuesto ante docentes de química con distintos niveles de formación y de experiencia tesis parecidas a las que defienden acá. Me he encontrado frecuentemente con un gran desconocimiento de la cuántica y, lo que es peor, con una convicción, nacida de la ignorancia, de que este es un tema incomprensible para un químico promedio y mucho más incomprensible aún para un licenciado en química, por lo tanto, la única alternativa es sustituirla por una imitación de sus resultados, desligados del contexto y de las bases.

Los logros que hemos obtenido en la Carrera de química de la Universidad Nacional muestran que esto no es cierto. Que muchachas y muchachos de veinte años, al cabo de sólo 135 horas de clase queden en capacidad de entender las teorías actuales muestra que ese temor es totalmente infundado. Ya es hora de terminar con este espantajo que tanto daño está causando y buscar que los licenciados en química del país se enteren de la química contemporánea y lleguen a dominar los conceptos vigentes en la actualidad. Entonces podremos abordar responsablemente el problema de la enseñanza de la estructura del átomo, de la molécula y del enlace químico en la enseñanza media. Mientras tanto, sería mejor que guardaran silencio sobre estos temas.

9. ¿CÓMO SE HACE?

El curso que hemos organizado en la Carrera de Química de la Nacional está orientado esencialmente al trabajo pedagógico con los estudiantes sobre tres conceptos: la estructura del átomo, la estructura de las moléculas y el enlace químico. Globalmente está dividido en tres grandes partes: en la primera parte se trabaja el desarrollo de estos conceptos antes de 1900. Se analiza el surgimiento de la idea de átomo en la antigüedad clásica y su resurgimiento en la edad moderna. Los fundamentos empíricos, teóricos y epistemológicos del tema y la manera como se fueron forjando modelos y encontrando problemas con ellos. Hay una gran cantidad de trabajo sobre el surgimiento de la química con Lavoisier, la relación entre lenguaje y ciencia, la afinidad creciente entre las ideas de elementos y de átomo. Luego se analiza el gran paso dado por Dalton al lograr pesar los átomos y dotarlos de masa, la cualidad física por excelencia. En este momento se indaga sobre las relaciones entre la electricidad y la química y las teorías electroquímicas de Berzelius, como primera explicación física del enlace químico. Se trabaja todo el problema creado sobre la interpretación electroquímica del enlace por el desarrollo de la química orgánica y la manera como fueron progresando simultáneamente por un lado la electroquímica, desde Faraday hasta Hittorf, quien logra medir la velocidad de los iones y, por lo tanto, convertirlos en objetos cada vez más físicos, y por el otro lado la química orgánica en la cual no convenía ninguna explicación electroquímica, pero en la cual se hace cada vez más necesario un análisis de la forma de [as moléculas para explicar la cuestión de los isómeros.

La formulación de la Ley Periódica por Mendeleev se analiza como evidencia de que el átomo no puede ser algo homogéneo, sin partes, sino que debe tener una armonía interna con propiedades periódicas. de manera que se llega a 1887 con átomos físicos, con masa, con velocidad,

con carga y con armonía interna, que además, dan lugar a moléculas con formas y simetrías precisas, en el momento en que Thomson descubre el electrón, que constituye un punto culminante del curso, pues se ve cómo la estructura del átomo debe estar relacionada con los electrones en su interior y se entiende la profusión de modelos de átomo postulados en la década siguiente. Se trabajan los modelos de Thomson (con seriedad, no hablando de pudines defresa), de Lewis, de Langmuir, de Kossel, de Rutherford y de Bohr.

La metodología de trabajo hasta este punto es la de leer los textos originales y analizar con cuidado la forma en que se fueron desarrollando los conceptos, es decir, cómo la idea de átomo es una idea forjada cuidadosamente en un proceso largo y tortuoso.

En este momento comienza la segunda parte del curso, que se centra en una presentación general de la Teoría Cuántica. Para esta parte no se requiere más que unas bases muy generales de cálculo diferencial y geometría analítica y unos elementos muy generales de mecánica clásica, no mucho más allá de los que se obtienen en el colegio², sin embargo, se analizan completamente los postulados de la Teoría Cuántica, se concretan en la formulación de Schrödinger y se hacen algunos ejemplos típicos, como las partículas en cajas uni, bi y tridimensionales, así como circulares, que permiten de una vez hacer algunos juegos con modelos elementales de moléculas orgánicas conjugadas o de estado sólido. Se estudia también con algún detalle el oscilador armónico unidimensional. La segunda parte termina con un estudio en profundidad del átomo de hidrógeno en la formulación de Schrödinger.

Estudiamos con bastante detalle el ejemplo del átomo de hidrógeno dentro del marco de la teoría cuántica. La justificación para hacerlo con mucho detalle proviene de muchas razones. En primer lugar, porque es el sistema más sencillo que puede empezar a llamarse de interés químico, al cual se pueda aplicar la metodología de la teoría cuántica. En segundo lugar, porque gran cantidad de la teoría desarrollada sobre átomos y moléculas desde 1930 hasta nuestros días se fundamenta en las soluciones a la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno.³ En tercer lugar, porque en el proceso de generación de lenguaje sobre átomos y moléculas que se ha basado en el átomo de hidrógeno y en

la difusión de los resultados de este proceso a través de los libros de texto, se ha generado una enorme cantidad de torpezas, de fábulas, de ideas imprecisas, de seudocconceptos, etc., que plagan la química contemporánea. Es importante por lo tanto

² De hecho, el curso se planeó en esta forma, sin prerequisites, pues nunca ha sido posible generar un diálogo constructivo con los físicos de la Universidad Nacional, que sostienen a ultranza y contra toda evidencia, que es imposible para un muchacho de primer o segundo semestre de universidad asimilar las bases de la cuántica, probablemente interesados en mantener el espantajo que mencionábamos arriba y que les permite conservar su aura de médicos-brujos. Esta intolerancia resultó, para nosotros, en una ganancia pedagógica.

³ Esto es consecuencia de que sea fácil obtener las soluciones exactas para el átomo de hidrógeno. Un método razonablemente común de aproximación a las soluciones de un problema difícil es buscar uno fácil al cual se parezca y construir las soluciones del difícil a partir de las del fácil, modificando lo necesario. Así, el método de buscar soluciones aproximadas a un átomo con N electrones es buscar las soluciones para un átomo con 1 electrón y tratar de ensamblarlas N veces. La mayor parte de las ideas de la química en el Siglo XX parten de este tipo de aproximación, que los jóvenes aprenden en el bachillerato, como la técnica de 'llenar orbitales' para representar átomos de N electrones como ensamblajes de N átomos unielectrónicos.

que el estudiante se familiarice desde el principio con las soluciones completas del átomo de hidrógeno, vea cómo nacen los números cuánticos, qué son los orbitales, de dónde sale la simetría esférica de los orbitales s, la cilíndrica de los p, etc.

Desarrollamos la solución cuántica de este átomo en varias versiones, de creciente nivel de complejidad y detalle, a la manera en que se dibujan los mapas de un territorio: primero un vistazo muy de lejos, a una escala pequeña, en que sólo se vean los aspectos más sobresalientes y generales; luego un vistazo a una escala mayor en la cual se vean algunos detalles más y, así sucesivamente, hasta llegar a la escala más detallada, en la cual se perciban todos los detalles, aunque sea más difícil ver en ella las relaciones globales. No queremos engañar. El tratamiento cuántico del átomo de hidrógeno es un tratamiento matemático. De hecho, se trata simplemente de escribir el hamiltoniano para este átomo, y de resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para él, encontrando así las funciones de onda y los valores de la energía compatibles con ella. Es decir, consiste en resolver una ecuación diferencial y analizar las soluciones. Esto sólo puede hacerse bien en el ámbito de la matemática. Y sólo haciendo el tratamiento matemático completo y analizando sus detalles podremos entender lo que pasa. Las sucesivas aproximaciones pueden ayudar a entender de qué se trata, pero nada nos exime de ver el tratamiento completo. Quien no lo entienda permanecerá científicamente antes del Siglo XX. Quien reemplace el tratamiento matemático por generalidades, por metáforas o por narraciones, corre el peligro de quedarse en la fábula y no en el conocimiento. Para la segunda parte aprovechamos el excelente texto de Cruz, Chamizo y Garritz.

Finalmente, la tercera parte aboca el tratamiento de los átomos polielectrónicos y las moléculas, la teoría de orbitales moleculares y su aplicación a múltiples ejemplos de la química. En el curso se hace énfasis especial en plantear los problemas de la imagen epistémicamente dual de las moléculas para que los estudiantes conozcan los logros y las limitaciones actuales de nuestras teorías de la estructura molecular y entiendan que, si hay resultados rigurosos, estos constituyen aun temas abiertos de investigación y no son dogmas de fe. Finalmente, se hace una presentación inicial de las recientes teorías de Richard Bader que, a nuestro juicio constituyen el ejemplo más serio en la actualidad de explicar rigurosamente la estructura de las moléculas, el enlace químico y la aparición del grafo molecular.

El curso se dicta apoyados en programas de cómputo de uso corriente como el Hyperchem, el Gaussian o el Gamess y así los estudiantes quedan en posibilidad de hacer ellos mismos cálculos de estructuras, optimizaciones de geometrías, estudio de reacciones sencillas y, sobre todo, de leer con tranquilidad la literatura química contemporánea.

10. COLOFÓN

Lo que estamos afirmando es que los licenciados deberían tener por lo menos un conocimiento igual sobre las teorías del átomo y de las moléculas. Si lo tuvieran, entonces sería factible adelantar investigación sobre cómo enseñarla sin engaños a los estudiantes de educación media. Este no es un problema pedagógico fácil, pero su solución es indispensable. Habría que comenzar por etapas, claro está, modificando los currículos en las licenciaturas de química para que los jóvenes adquirieran este conocimiento. Nuestra experiencia es que es posible y agradable y que, con un trabajo serio, no sólo se pierde el miedo, sino que se gana la inmensa satisfacción del conocimiento firme y sereno. Un

paso adicional sería ir creando en las Facultades de Educación grupos de profesores que asumieran la tarea de aprender, aprehender, enseñar e investigar la pedagogía de la estructura del átomo y de la molécula, asumiéndolas tal como nos las dejó el Siglo XX. No hacerlo equivale a condenar a nuestra nación a mantenerse en la superstición y la oscuridad.

BIBLIOGRAFIA

Cruz, D.; Chamizo, D.; Garriz A. "Estructura Atómica. Un enfoque químico". Fondo Educativo Interamericano 1986.

Véase, por ejemplo, Daza E. E. y Villaveces J. L. "The Concept of Chemical Structure" in Rouvray D. (ed) "Concepts in Chemistry", J.Wiley & sons 1997.

Bader, R. "Atoms in Molecules. A quantum theory". Oxford University Press. 1990.