

MODELOS DEL ENLACE QUÍMICO*

José Antonio Chamizo G

Departamento de Química Inorgánica
Facultad de Química, UNAM

En este trabajo se expone, brevemente, el desarrollo de los diferentes modelos de enlace químico que se han elaborado en los últimos doscientos años. Se insiste además en cómo el desconocimiento de esta evolución histórica nos ha llevado a confusiones y a interpretaciones equivocadas acerca de la estructura química de la materia.

El enlace químico

Como resultado de los trabajos de Newton, la mecánica y la fuerza de gravedad entraron de lleno en el mundo de la química, y no es extraño encontrar que una de las primeras explicaciones del enlace químico, dada por T. Bergman y C.L. Berthollet a finales del siglo XVIII, propusiera a la fuerza de gravedad como la principal responsable del mismo. Sin embargo, inmediatamente surgió un problema irresoluble, ya que este modelo no podía explicar la gran estabilidad del agua al calentamiento comparada con la del óxido de mercurio, el cual, por ser más pesado, debería ser más estable.

Se necesitaba otro tipo de fuerza para explicar el enlace químico, la cual se encontró casi inmediatamente, ya que los experimentos con la electricidad estaban en ese momento dando resultados espectaculares, uno de los cuales, la descomposición electrolítica del agua en hidrógeno y oxígeno, realizado por W. Nicholson y A. Carlisle a principios del siglo XIX, indicó la naturaleza eléctrica del enlace. El químico sueco J.J. Berzelius extendió esta idea y llegó a identificar a la electricidad como el *primum movens* de todos los procesos químicos, elaborando una rudimentaria tabla de electronegatividad en la que identificaba a unos átomos como posi-

tivos (el potasio por ejemplo) y a otros como negativos (el oxígeno). La afinidad química y, por lo tanto, la formación de un enlace era debida a la atracción y neutralización de cargas opuestas¹.

El prestigio de Berzelius era tal que sus ideas se aceptaron en casi toda Europa, no obstante años más tarde, cuando los experimentos de A. Laurent sobre la sustitución de hidrógeno por halógenos en compuestos aromáticos no pudieron ser explicados por este modelo, la idea de la naturaleza eléctrica del enlace se perdió en lo que desde ese tiempo se llamaría química orgánica. En esta área se dió el siguiente salto, pasando de la teoría de los radicales a la de los tipos y, finalmente, al concepto de valencia propuesto por E. Frankland en 1852 como resultado de sus investigaciones en compuestos organo-metálicos. La idea de la valencia alcanzó con los trabajos de F. Kekulé, A. M. Butlerov y J. H. Van't Hoff un cuerpo de teoría el cual podía "explicar" muchos de los resultados experimentales de ese momento, propiciando con ello un desarrollo extraordinario. Sin embargo, el concepto de valencia no indica necesariamente el por qué del enlace².

Fuera del campo de la química orgánica se dieron, hacia finales del siglo pasado, varios descubrimientos que cambiarían totalmente la concepción que se tenía del átomo y posteriormente del enlace. Algunos de ellos son:

* Presentado en Mayo de 1987

- Los trabajos de S. Arrhenius sobre la conductividad y la disociación iónica.

- El descubrimiento del electrón por J.J. Thomson.

- El descubrimiento de los gases nobles y la verificación de su carencia de reactividad.

- La Teoría de Coordinación de A. Werner.

- El nacimiento de la mecánica cuántica como resultado de los trabajos de M. Planck.

Así, a principios de este siglo se caracterizaban químicamente tres tipos de sustancias, las cuales requerían aparentemente un tipo particular de enlace³:

- Los electrolitos como las sales inorgánicas, cuyo enlace podía ser del tipo propuesto por Berzelius.

- Los no electrolitos con valencia constante, como es el caso de los compuestos orgánicos.

- Los compuestos moleculares, que no tienen valencia constante y pueden conducir la corriente eléctrica en solución, como por ejemplo los compuestos de coordinación.

Es hasta 1916 cuando se reúnen en dos modelos de enlace distintos los resultados de los descubrimientos del siglo anterior, y se intenta de nuevo explicar el enlace para estos tres tipos de sustancias.

G. N. Lewis, químico de la Universidad de Berkley (EU) concluyó de su modelo del átomo cúbico, que es a partir de un par de electrones que se comparten, como se pueden explicar las características de las sustancias antes mencionadas, siendo la diferencia entre ellas función del grado en el que se comparten estos electrones. Propuso además, que es la adquisición de la configuración electrónica de los gases nobles lo que da estabilidad a los compuestos químicos⁴.

Por otro lado, el físico alemán W. Kossel sugirió en el mismo año que el enlace es de tipo electrostático, resultado de la carga que adquieren los átomos para alcanzar la configuración de gas noble. Así por ejemplo, el tetracloruro de carbono estaría formado por los iones Cl^- y C^{4+} y, a diferencia del modelo de

Berzelius, no se requiere neutralidad eléctrica en las especies finales, por lo cual se podían obtener iones tales como el $[\text{AlF}_6]^{3-}$.

Tres años después I. Langmuir reúne ambos modelos en uno sólo y establece que hay dos tipos de enlace diferentes, el covalente y el electrovalente (acuñando él mismo estos términos). Enunció también la ley del octeto, e introdujo el concepto de carga formal e isosterismo. Con todo esto, logra explicar gran número de propiedades químicas y físicas de los tres tipos de sustancias que mencionamos anteriormente, en particular, las de los compuestos orgánicos⁵.

La aceptación y, por lo tanto, la influencia de este trabajo en la evolución de los modelos sobre el enlace químico es notable, ya que prácticamente toda la comunidad química se pronunció a su favor. Como podemos ver en la Tabla I, la cantidad de trabajos que se publicaron al respecto es muy grande y el decremento de los mismos hacia 1927 se debe, básicamente, a que ya formaba parte del cuerpo teórico de la química, y no necesitaba entonces más discusión.

N. V. Sidgwick propagó aún más el modelo de Langmuir sobre los dos tipos diferentes de enlace en su conocido libro *The Electronic Theory of Valency* empleando, como un ejemplo de la diferencia entre estos tipos de enlace la

TABLA I
Artículos publicados sobre el modelo de Lewis-Langmuir de 1918 a 1927⁶.

	Inglaterra	EU	Alemania	Otros	Total
1918	-	-	2	2	4
1919	-	5	2	-	7
1920	9	4	4	-	17
1921	3	7	1	1	12
1922	10	8	1	1	20
1923	29	2	3	3	37
1924	10	5	-	1	16
1925	1	4	-	1	6
1926	-	1	2	1	4
1927	-	1	-	1	2
Total	62	37	15	11	125

discontinuidad de los valores de los puntos de fusión de varios fluoruros (véase Tabla II)

Sidgwick identificaba altos puntos de fusión con enlaces iónicos (electrovalentes) y bajos puntos de fusión con enlaces covalentes. Es irónico el hecho de que Kossel, siete años antes, en 1920, había planteado esta misma serie y, más aún, la explicó empleando únicamente su modelo electrostático.

De igual manera, podríamos decir que los parámetros que generalmente se utilizan para clasificar a los compuestos químicos según su "tipo" de enlace, como son la disociación iónica, su punto de fusión y su energía y distancia de enlace, no están determinando básica y únicamente la naturaleza del enlace, sino más bien, otro tipo de fenómenos, y lo que resulta aún más importante es que diversos modelos de enlace pueden describir las mismas propiedades⁷.

Otra suerte corrió el modelo de Kossel recogido por varios físicos europeos como M. Born, F. Haber, A. Landé, E. Madelung y H. Bethe quienes, en los años veinte, lo emplearon en cálculos que van desde el análisis de la energía de la red cristalina en un sólido, hasta el desdoblamiento de orbitales en un elemento de transición por efecto del campo cristalino. En todos estos trabajos se manifiesta, básicamente, la utilidad del modelo para describir compuestos iónicos. Su extensión, gracias a las aportaciones de K. Fajans, en el sentido de indicar cómo este modelo podía explicar características "covalentes" no logró convencer a la mayoría de los químicos, para los cuales las ideas de Langmuir y Sidgwick eran más convincentes. Sin embargo, al aceptar el modelo de Langmuir y Sidgwick surgieron varios tipos de problemas, uno

de los cuales, el de identificar el origen de los electrones en la molécula, llevó a Lewis a discrepar de Langmuir, ya que él insistía en que el factor más importante del enlace químico era el grado de compartición de los electrones, independientemente de dónde vinieran (Tabla III). No obstante, el modelo de Langmuir sobre covalencia y electrovalencia terminó imponiéndose y actualmente todavía pensamos en el enlace químico de esta manera.

Tal vez el evento más importante en la historia de la química del siglo XX, es la unificación teórica de la física y la química cuando, en 1927, la mecánica

TABLA III
Nombres con los que se designó
al enlace A:B entre 1923 y 1933

1923	T. Lowry	Enlace mixto doble
1925	S. Sudgen	Enlace doble semipolar
	Palmer	Enlace co-iónico
1933	W.A. Noyes	Enlace semi-iónico

cuántica se emplea por primera vez para estudiar el enlace químico. Antes de esta unificación, Langmuir escribía en torno a los modelos físicos del átomo lo siguiente: "El problema de la estructura de los átomos ha sido estudiado principalmente por los físicos, quienes consideran de manera muy pobre las propiedades químicas, las que en última instancia deben ser explicadas por una teoría de la estructura atómica. La gran cantidad de conocimientos que sobre las propiedades químicas se tienen y las relaciones como las que resume la tabla periódica, deben emplearse como un mejor fundamento para la teoría de la estructura atómica, que los relativamente escasos datos experimentales obtenidos con ideas físicas".

Este párrafo, tomado de un trabajo publicado en 1919 indica en qué concepto tenía Langmuir el modelo atómico de Bohr⁸. Sin embargo, los trabajos de W. Heitler y F. London cambiaron esta idea, y es a partir de la descripción mecánica cuántica del átomo como se generaron dos modelos de enlace. En el

TABLA II
Punto de fusión (°C)
de los fluoruros del tercer período

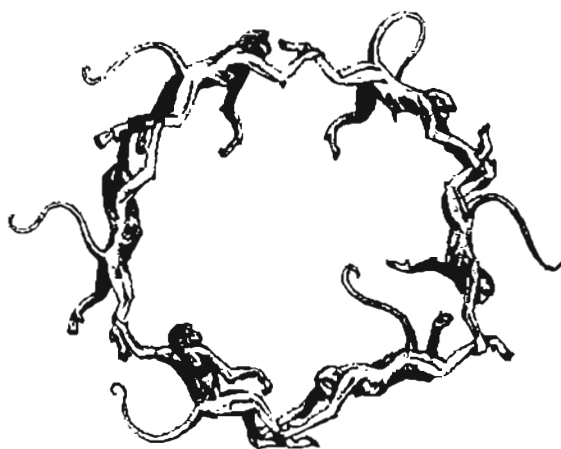
NaF	MgF ₂	AlF ₃	SiF ₄	PF ₃	SF ₆
988	1266	1291	-90	-94	-50

primero de ellos, precisamente el que fue desarrollado por Heitler y London conocido como modelo de unión valencia (MUV), la función de onda es construida de manera que la separación de los átomos y la localización de los orbitales es enfatizada; en el segundo, los elementos se sitúan en orbitales deslocalizados sobre toda la molécula, por lo que el nombre de este modelo es el de orbitales moleculares (MOM) y fue desarrollado por R. S. Mulliken en los años treinta.

Es importante aclarar que ambos modelos, a pesar de partir de puntos de vista diferentes, llegan al mismo resultado final, siempre y cuando, a las funciones de onda empleadas se les adicione un número extra de términos.

Empleando estos dos modelos se pueden describir los diversos "tipos" de enlace (covalente, iónico, metálico, de hidrógeno), utilizando además varias clases de "fuerzas" como son las dipolo-dipolo, de dispersión, de Van der Waals, etcétera. Toda esta variedad de enlaces es resultado de una discontinuidad en nuestros modelos, y no reflejan necesariamente una discontinuidad real en las fuerzas involucradas en las interacciones. Esto es, el tipo de fuerzas de las que hemos hablado, así como por ejemplo, la energía de resonancia, son únicamente aproximaciones matemáticas, y no corresponden a una realidad física.

La energía total de un sistema atómico, como la de cualquier otro, es básicamente cinética y potencial (esta última, de naturaleza electrostática), requiriendo además correcciones relativistas cuando los átomos son pesados⁹. Sin embargo en estos sistemas se presenta un tipo de interacción no eléctrica, que no tiene un equivalente clásico, resultado de determinadas características de simetría del electrón y que corresponde a la correlación espín-espín. Esta interacción permite que dos electrones, con espines contrarios, puedan ocupar regiones del espacio cercanos sin que los separe la fuerza de repulsión eléctrica resultante de sus cargas iguales. No obstante, si los espines son iguales, la



separación entre ellos será máxima según el principio de exclusión de Pauli.

Llegamos a un punto en el que podemos reunir todo lo dicho anteriormente y enfrentar de nuevo el problema del enlace químico. Considerando el principio de exclusión de Pauli, se puede construir una función de onda que aproxime el estado basal del sistema; ésta correspondería según el modelo de orbitales moleculares (MOM), a la función de onda que mejor describiría al sistema basal ya que, además de considerar la configuración basal, contiene las demás configuraciones que representarían estados excitados del mismo.

La complejidad de estos modelos rebasa los aspectos históricos que se pretenden discutir aquí, por lo que a los lectores interesados les sugiero remitirse a la referencia 1.

Si la construcción de las funciones de onda se hace lo más exacta que sea posible, se puede clasificar a las especies químicas con base en la descripción de su enlace (Tabla IV).

Es posible actualmente describir cualquier sistema atómico en cualquier estado de agregación, por lo que volvemos a ver los llamados enlaces covalente e iónico, los cuales no son diferentes tipos de enlace, sino más bien corresponden a modelos diferentes.

La solución de las ecuaciones para el modelo de orbitales moleculares se ha alcanzado para sistemas muy pequeños, siendo ésta su más importante

limitación. Sin embargo, allí está la mejor respuesta que tenemos hasta el momento para la pregunta que ya habrían planteado hace aproximadamente doscientos años Bergman y Berthollet.

Puede entonces concluirse que se debe hablar de diferentes modelos y no de tipos diferentes de enlace. La construcción de los mismos ha requerido un conocimiento más profundo de la estructura atómica. Se puede finalizar recordando algunos comentarios que se hicieron con motivo del descubrimiento de los gases nobles: "la teoría del octeto tiene poder explicatorio en lugar de predictivo; su aceptación general indica, de alguna manera, que ésta impidió cualquier intento serio, antes de 1962, para sintetizar compuestos de gases nobles".

"Desde el punto de vista técnico hubiera sido posible la síntesis de los compuestos de gases nobles veinte años antes de lo que se hizo"⁶.

Veinte años antes.....vale la pena tenerlo presente.

Notas y bibliografía

¹ D. Cruz, J. A. Chamizo y A. Garritz., *Estructura Atómica: un enfoque Químico*. Fondo Educativo Interamericano. México, 1986.

² H. M. Leicester, *Panorama Histórico de*

la Química, Alhambra, Madrid, 1967.

W. G. Palmer, *A History of the Concept of Valency to 1930*, Cambridge University Press, Cambridge, 1965.

³ Aquí no se consideran los metales, sin embargo la descripción del enlace en estos materiales, que originalmente requirió de la formulación del modelo del enlace metálico, particularmente útil para explicar la conductividad eléctrica y térmica de los mismos, ha sido cuestionada al encontrarse especies provenientes de la química orgánica (TTF-TCNQ) y la inorgánica (SN)_x que presentan características metálicas. En el artículo de J. Livage, *Mundo Científico* 1, 55, se discute ampliamente este problema.

⁴ Una excelente serie de artículos sobre G. N. Lewis apareció a lo largo de 1984 en el *Journal of Chemical Education*.

⁵ D. Cruz, J. A. Chamizo y A. Garritz. Emplear la historia para enseñar química. Las investigaciones de Irving Langmuir sobre la estructura atómica. 1er. Congreso Nacional de Educación en el Área de Química. Cuernavaca, Mor., 1981.

⁶ H. Gay, *Studies on the History and Philosophy of Science*, Vol. 8, 1977, p. 61.

⁷ R. T. Sanderson, *Journal of Chemical Education*, Vol. 44, 1967, p. 566.

⁸ I. Langmuir, *Journal American Chemical Society*, Vol. 41, 1919, p. 868.

⁹ Los efectos relativistas en las propiedades atómicas han sido discutidos por K. S. Pitzer, P. Pyykko y J. P. Desclaux en dos artículos publicados en *Accs. Chemical Rev.* Vol. 12, 1979, pp. 271- y 276-.

¹⁰ W. B. Jensen, *The Lewis Acid-Base Concepts*, Wiley New York, 1980.

TABLA IV
Clasificación de las especies químicas*

	Descripción	Ejemplos
Clase I	Capa cerrada y estado basal aislado.	Hidrocarburos no conjugados. Sólidos no moleculares. Electrolitos.
Clase II	Capa cerrada y alta densidad electrónica en orbitales vacíos de baja energía.	Hidrocarburos conjugados. Metales. Compuestos de coordinación diamagnéticos.
Clase III	Capa abierta.	Radicales libres y compuestos de coordinación paramagnéticos.

* Modificada de Jensen ¹⁰