



Scripta Philosophiæ Naturalis, 14 : 93-109 (2018)

ISSN 2258 – 3335

ENLACE QUÍMICO, ORBITAL MOLECULAR Y ONTOLOGÍA

Gabriela GARCÍA ZERECERO

RESUMEN: Aunque el enlace juega un papel importante en las predicciones, intervenciones y explicaciones químicas, no obstante, es un concepto difícil de definir con precisión. Esta situación parece poner de manifiesto la incertidumbre o tal vez la ambivalencia sobre el estatus del enlace químico, lo que lleva a plantear algunas cuestiones filosóficas sobre su naturaleza: ¿son reales los enlaces químicos? Si lo son, ¿debemos pensar en ellos como una entidad? Si los enlaces no son reales, ¿lo es el fenómeno del enlace? En caso de serlo, ¿cómo debe ser caracterizado este fenómeno? ¿Cuál es la relación entre estructura molecular y enlace? Los químicos explican el hecho del enlace químico adoptando la noción de interacción orbital, que es una aplicación a la química de la mecánica ondulatoria. El debate sobre la visualización de los orbitales moleculares ha trasladado la discusión sobre la caracterización de las entidades químicas del ámbito epistemológico al ontológico: ya no se trata de establecer el papel explicativo del concepto de orbital, o la posibilidad de su descripción en términos de la mecánica cuántica, sino de saber si los orbitales existen o no. El objetivo del presente trabajo es mostrar que más que el cuestionamiento sobre si el enlace químico y los orbitales existen o no existen, la pregunta es más bien cómo o como qué existen.

Palabras clave: Enlace químico. Orbital molecular. Ontología. Modelización molecular.

INTRODUCCIÓN

Si hubiera que elegir un único concepto básico sobre el que se construye la Química, optaríamos, sin duda, por el de enlace químico ya que éste permite definir y caracterizar las entidades químicas. El desarrollo de este concepto a lo largo del siglo XX no sólo nos conduce a la comprensión de la estructura de las moléculas, sino que también nos permite definir las reacciones químicas como el resultado de una reestructuración de uniones entre átomos.¹

El concepto de enlace químico aparece ya en la Antigüedad prácticamente junto con la noción de átomo. Desde el momento en que se admitió la existencia de partículas elementales, fue necesario también imaginar una fuerza capaz de unir las para asegurar la cohesión de la materia. Desde Demócrito, que pensaba que los átomos podían unirse por medio de pequeños ganchos, hasta las teorías de afinidad de la Edad Media, este conocimiento fue más bien poco científico. Hubo que esperar al siglo XIX para que aparecieran las primeras teorías físicas sobre el enlace. Surge entonces la noción de valencia que, según la naturaleza orgánica o inorgánica de los compuestos estudiados, conduce a dos tipos de enlace totalmente diferentes: el covalente y el electrovalente o iónico. Químicos orgánicos e inorgánicos elaboraron, cada uno por su parte, modelos de enlace que les permitieran explicar los fenómenos observados.²

Muchos de los principios generales sobre la estructura molecular y la naturaleza del enlace químico fueron formulados por los químicos por inducción a partir de un gran conjunto de hechos químicos. En décadas recientes y gracias al uso de métodos experimentales más desarrollados y a la aplicación de teorías de la física moderna, estos principios se han hecho más precisos e incluso se han descubierto nuevos principios de la química estructural.³

El enlace es un elemento crucial para entender cómo se comporta la materia. El punto de partida de la explicación química es una estructura molecular de la sustancia en cuestión, una estructura molecular que acaba siendo un conjunto de átomos unidos entre sí de una manera determinada por medio de enlaces. Las reacciones químicas se entienden en términos de ruptura y formación de enlaces. A

¹ Cfr. CONTRERAS GARCÍA, J. & OTERO-DE-LA-ROSA, A. & RECIO, J. M., “El enlace químico y su supervivencia en la química cuántica”, *Anales de Química*, Vol.110-2 (2014), 113.

² Cfr. LIVAGE, J., “El Enlace Químico”, en ANDRÉS, J. & ANGLÉS, M. A. & OPIS, R. & NIEVES, M. & REMIRO, F., *Introducción a los modelos de enlace químico*, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia 1993, 112-113. Pauling considera tres tipos generales de enlaces: los enlaces electrostáticos (dentro de este tipo incluye al enlace iónico y al enlace dipolo-dipolo, que ocurre cuando hay una atracción electrostática entre el extremo positivo de una molécula polar y el negativo de otra), los enlaces covalentes y los enlaces metálicos. Cfr. PAULING, L., *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, 3a. ed., Cornell University Press, New York 1960, 5-7.

³ Cfr. PAULING, L., *op. cit.*, 3.

partir de la mitad del siglo XIX, los químicos comenzaron a explicar el comportamiento de las sustancias en términos de fórmulas estructurales. Estas, al principio, no se entendieron como la representación de hipótesis sobre la disposición de los átomos en el espacio, sino como patrones de reacción química de la sustancia codificante o, también, como las conexiones topológicas entre sus átomos. Con el progreso de la estereoquímica a finales del siglo XIX vino también un resurgimiento de las fórmulas estructurales.⁴

El enlace juega un papel importante en las predicciones, intervenciones y explicaciones químicas, no obstante, es un concepto difícil de definir con precisión. Existen diferencias fundamentales entre la concepción clásica del enlace químico y la concepción de la mecánica cuántica, así como diferencias entre los diversos modelos de la mecánica cuántica. En la medida en que se profundiza en los distintos tratados sobre el tema, se van encontrando muchas aproximaciones teóricas, pero pocas caracterizaciones directas sobre el enlace y casi ninguna definición del mismo. Esta situación parece poner de manifiesto la incertidumbre o tal vez la ambivalencia sobre el estatus del enlace químico.⁵

Este tipo de ambigüedades ha llevado a los químicos a diferentes conclusiones. Muchos químicos adoptan una postura pragmática y se conforman con que las teorías sobre el enlace sean útiles para hacer predicciones y contribuyan a la síntesis de nuevas moléculas. En este caso, el estatus ontológico que subyace al enlace químico carece de interés, y no se da una respuesta a las cuestiones fundamentales sobre la naturaleza del enlace químico.⁶

Otros químicos asumen una postura escéptica, entre ellos algunos de los fundadores de la química cuántica. R. Mulliken, por ejemplo, afirmó que el enlace químico no es tan simple como parece pensarse, y Ch. Coulson⁷ declaró que el enlace químico es “una ficción de nuestra imaginación”.⁸ Estos químicos pensaban que el progreso de la mecánica cuántica mostraba que hay algo deficiente en la noción química de enlace lo cual parece difícil de aceptar dada la utilidad y omnipresencia del concepto de enlace.⁹

⁴ Cfr. HENDRY, R. F., “Two Conceptions of the Chemical Bond”, *Philosophy of Science*, Vol. 75, No. 5 (2008), 909.

⁵ Cfr. WEISBERG, M., “Challenges to the Structural Conception of Chemical Bonding”, *Philosophy of Science*, No. 75 (2008), 933.

⁶ Cfr. *idem*, 934.

⁷ Coulson fue un pionero en la aplicación de la teoría cuántica de valencia a problemas de estructura molecular, dinámica y reactividad. Cfr. COULSON, CH. A., *Early Ideas in the History of Quantum Chemistry* en:

<http://www.quantum-chemistry-history.com/Coulson1.htm> [consultada el 17-IX-2015].

⁸ Tal parece que, para estos autores, el enlace químico cumple una función de cualidad oscura que nos permite generar modelos funcionales, pero cuya matriz ontológica es dudosa o, al menos, incognoscible.

⁹ Cfr. WEISBERG, M., *op. cit.*, 934-935.

El escepticismo de Coulson y Mulliken lleva a plantear algunas cuestiones filosóficas sobre la naturaleza del enlace químico y de la estructura molecular. ¿Son reales los enlaces químicos? Si lo son, ¿debemos pensar en ellos como una entidad? Si los enlaces no son reales, ¿lo es el fenómeno del enlace? En caso de serlo, ¿cómo debe ser caracterizado este fenómeno? ¿Cuál es la relación entre estructura molecular y enlace? El intento de respuesta a estas preguntas necesariamente debe tener en cuenta tanto el análisis y la argumentación filosófica como un examen cuidadoso de la teoría química misma. Este último aspecto se presenta complicado dadas las numerosas teorías de variada complejidad que se han desarrollado para explicar la estructura molecular y la naturaleza del enlace.¹⁰

§ 1. — DOS CONCEPCIONES DEL ENLACE QUÍMICO

1.1 El enlace químico según la perspectiva clásica

La primera teoría relevante sobre el enlace químico fue propuesta por G.N. Lewis en un artículo publicado en 1916 que constituye la base de la teoría electrónica moderna. Lewis distinguió entre lo que se llamarían compuestos iónicos y covalentes. Su propuesta explicó no sólo la formación de iones al completar orbitales estables de electrones, sino también la formación del enlace covalente, que se produce cuando se comparten dos electrones entre dos átomos.¹¹

Lewis mostró que los conocimientos relativos a la estructura atómica podrían adaptarse para proporcionar una base adecuada para los conceptos de enlace en la química inorgánica y orgánica. Con frecuencia, los átomos ganan, pierden o

¹⁰ Cfr. *idem*, 935.

¹¹ El siguiente texto nos puede ayudar a visualizar la relevancia de la propuesta de Lewis. “Según W. B. Jensen, profesor de Historia de la química en la universidad de Cincinnati, hay tres revoluciones en la historia de la química moderna: la primera (1770-1790) llevó a la clarificación de los conceptos de sustancias simples y compuestos y explicó el papel del calor y conservación de la masa en los cambios de estado de las reacciones químicas. Esta primera revolución se realizó gracias a los trabajos de Lavoisier y algunos colaboradores y una síntesis puede encontrarse en el *Traité élémentaire de chimie* (1789) del mismo Lavoisier. La segunda revolución química (1855-1875) condujo al cálculo de los pesos atómicos, al establecimiento de las fórmulas moleculares, al concepto de valencia, a la formulación de la ley periódica y a la teoría estructural clásica. Esta revolución fue realizada por varios químicos entre los que se encuentran Cannizzaro, Williamson, Frankland, Odling, Wurtz, Couper, Kekulé y van't Hoff. La monografía de Lothar Meyer (1864) *Die modernen Theorien der Chemie und ihre Bedeutung für chemische Statik*, es un texto característico de esta segunda revolución. Finalmente, la tercera revolución (1904-1924) condujo a la teoría electrónica moderna del enlace químico y reactividad, y puede considerarse como la obra paradigmática de esta revolución *Valence and the Structure of Atoms and Molecules* de G. N. Lewis (1923)”. JENSEN, W. B., “The *Traité* of the Third Chemical Revolution. A Tribute to ‘Valence and the Structure of Atoms and Molecules’”, en: <http://www.che.uc.edu/jensen/W.%20B.%20Jensen/Unpublished%20Lectures/Chemistry/05.%20G.%20N.%20Lewis%201'.pdf> [consultada el 17-IX-2015]. La traducción es mía.

comparten electrones tratando de obtener una configuración electrónica similar a la de los gases nobles más cercanos a ellos en la tabla periódica. Los gases nobles (con excepción del He) tienen ocho electrones de valencia lo que les confiere una gran estabilidad. Esta observación dio lugar a la regla del octeto según la cual los átomos tienden a ganar, perder o compartir electrones hasta estar rodeados por ocho electrones de valencia. Con base en lo anterior, Lewis describió el enlace químico como un par de electrones compartidos por dos núcleos atómicos a fin de completar ocho electrones en la capa externa o capa de valencia de los átomos involucrados. El carácter polar o iónico de los compuestos químicos es una consecuencia de los diferentes modos en que los átomos comparten electrones.¹²

El enlace iónico es el resultado de la atracción entre iones de carga opuesta. Las cargas de los iones se pueden determinar en términos de la configuración electrónica (estructura electrónica) de los átomos, comparándolos con la configuración electrónica de un gas noble. Los átomos de los elementos metálicos pierden sus electrones más externos fácilmente, mientras que los elementos no metálicos tienden a añadir electrones adicionales. De este modo, pueden formarse cationes y aniones estables y mantener esencialmente sus estructuras electrónicas mientras que se aproximan unos a otros para formar moléculas estables o cristales. El enlace iónico o electrovalente se da cuando se unen dos átomos como consecuencia de la presencia de atracción electrostática entre los iones de distinto signo. En este tipo de enlace uno de los átomos capta electrones del otro.¹³

El enlace covalente se produce cuando dos átomos se unen para alcanzar un octeto estable, compartiendo electrones de la última capa o capa de valencia, de modo que cada elemento que participa en el enlace cumple con la regla del octeto. Los compuestos covalentes son o moléculas individuales o estructuras repetidas indefinidamente. El gas hidrógeno, por ejemplo, consiste de moléculas compuestas de dos átomos de hidrógeno unidas entre sí por un enlace covalente simple; el gas oxígeno está formado por moléculas compuestas de dos átomos de oxígeno y un enlace doble; el metano, por moléculas compuestas de cuatro enlaces simples carbono-hidrógeno equivalentes, y los cristales de dióxido de silicio (arena) por un despliegue indefinido de unidades SiO_2 unidas covalentemente.¹⁴

Para la comprensión del enlace que une a una molécula de dos átomos idénticos (enlace homopolar o covalente), Lewis supuso que la configuración más estable de los átomos que componen la molécula podría lograrse por la formación de pares de electrones compartidos por los átomos de tal forma que, para estos electrones, ya

¹² Cfr. ROSEMBERG, J. & EPSTEIN, L. M. & KRIEGER, P. K., *Química*, 10ª. ed., Mac Graw Hill, México 2013, 276 y 282 y LOMBARDI, O. & MARTÍNEZ, J.C., “Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué se refiere la química cuántica?”, *Scientiae Studia*, Vol. 10, No. 4 (2012), 651.

¹³ Cfr. PAULING, L., *op. cit.*, 6.

¹⁴ Cfr. WEISBERG, M. *et al.*, *op. cit.*

no sería posible decir si pertenecen a uno u otro átomo. Es decir, se admite que los dos electrones, por el hecho de constituir un enlace, forman parte simultáneamente de las dos configuraciones atómicas. Para expresar de manera simbólica la idea de la combinación química, Lewis utilizó dos puntos como enlace de la unión entre dos átomos de manera que se puede escribir, por ejemplo, H:H para la molécula de hidrógeno. La química molecular se convirtió así en la ciencia del comportamiento de los electrones periféricos de la entidad química. Las propiedades del electrón o de los electrones, en tanto que tales, desaparecen. Es su configuración la que se reconoce como causa directa o indirecta de todas las propiedades químicas.¹⁵

La concepción de enlace covalente como un par de electrones compartidos resultó ser muy útil para los químicos, en concreto para el desarrollo de los mecanismos de reacción en la química orgánica. Sin embargo, la idea fundamental sobre la concepción de enlace de Lewis resulta paradójica si se tienen en cuenta las leyes clásicas de la física que se refieren a las propiedades de las partículas cargadas eléctricamente. ¿Cómo pueden dos electrones cargados negativamente formar un enlace cuando, de acuerdo con la ley de Coulomb, deberían repelerse entre sí?¹⁶

Una posible solución a este problema parecía encontrarse en la aplicación de la mecánica cuántica ya que esta considera las moléculas como sistemas de electrones y núcleos que interactúan electrostáticamente. Bajo esta premisa, el enlace covalente podría explicarse como la participación de una acumulación de carga electrónica entre los núcleos, lo que permitiría a los electrones ser atraídos por ambos núcleos al mismo tiempo a la vez que se reduciría su energía potencial.¹⁷

1.2 El concepto de enlace y la química cuántica

L. Pauling fue uno de los primeros químicos en aplicar las nociones de la mecánica cuántica para explicar la naturaleza del enlace químico. Para Pauling “existe un enlace químico cuando las fuerzas que actúan entre dos átomos o grupos de átomos son tales que dan lugar a la formación de un agregado con la suficiente estabilidad de tal modo que pueda considerarse una especie molecular inde-

¹⁵ Cfr. MANFREDI, A., *Le caractère holistique des systèmes matériels en chimie moléculaire*, Thesis ad Doctorandum in Philosophia totaliter edita, Pontificia Università della Santa Croce, Romae 2003, 66-67.

¹⁶ Cfr. NEEDHAM, P., “The Source of Chemical Bonding”, *Studies in History and Philosophy of Science*, No. 45 (2014), 1.

¹⁷ Cfr. *ibidem*. En 1927, en una investigación que hizo época, Walter Heitler y Fritz London consiguieron formular la teoría del par electrónico de Lewis a una forma física más satisfactoria con la ayuda de la mecánica cuántica. Cfr. FISHER-HJALMARS, I., *Presentation Speech to R. Mulliken Nobel Prize in Chemistry (1966)*, “Nobelprize.org”. Nobelprize.org. Nobel Media AB 2014, en: http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1966/press.html [consultada el 22-IX-2015].

pendiente”.¹⁸ Con esta definición se incluyen dentro de la categoría “enlace químico” no solo el enlace de valencia dirigido, de los químicos orgánicos, sino también aquellos enlaces en los que se puede asignar a cada uno de dos átomos o grupos de átomos una estructura electrónica definida, esencialmente independiente de la presencia del otro átomo o grupo, y de tal manera que las interacciones electrostáticas conducen a una fuerte atracción y a la formación de un enlace químico.¹⁹

La definición de Pauling manifiesta también la existencia de fuerzas entre los átomos o las agrupaciones de átomos en cuestión y que la existencia del enlace es concomitante a las fuerzas que actúan. Hay una relación de causa efecto entre la existencia de fuerzas actuantes o interacciones y el enlace. El autor no nos dice que el enlace es una fuerza o un conjunto de fuerzas, sino que el enlace existe cuando estas fuerzas actúan. Es decir, el enlace es un efecto de la acción de fuerzas, es el resultado de una actualización de lo que los físicos llaman fuerza. Estas fuerzas son de naturaleza electromagnética. Siendo el enlace el resultado de interacciones recíprocas, hablar de cambio cualitativo no es inexacto. El enlace químico puede entenderse como una alteración física, un cambio que hace posible que exista un cierto tipo de unidad.²⁰

La formación de un enlace puede considerarse como un evento estabilizante, de hecho, como un efecto definitorio. “El enlace químico es el proceso físico responsable de las interacciones entre átomos y moléculas, y confiere estabilidad a los compuestos químicos”. Si dos átomos pueden liberar energía al formar un enlace, entonces serán más estables juntos de lo que serían cada uno por separado. Por lo anterior, se puede hablar de molécula cuando la estabilidad del agregado es suficiente, y cuando ésta existe, entonces se puede hablar de independencia. La independencia se funda sobre la estabilidad del compuesto químico.²¹

Pero la interacción enlazante tiene un límite. Según Pauling, no toda interacción entre dos átomos o grupos de átomos es necesariamente un enlace químico. Es el caso, por ejemplo de las fuerzas de van der Waals, que son distintas y relativamente débiles comparadas con las de los enlaces químicos.²²

¹⁸ PAULING, L., *op. cit.*, 6: *We shall say that there is a chemical bond between two atoms or groups of atoms in case that the forces acting between them are such as to lead to the formation of an aggregate with sufficient stability to make it convenient for the chemist to consider it as an independent molecular species.* La traducción es mía.

¹⁹ Cfr. *ibidem*.

²⁰ Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 73.

²¹ Cfr. BERSON, J. A., “Molecules with Very Weak Bonds: The Edge of Covalency”, *Philosophy of Science*, Vol. 75, No. 5 (2006), 952.

²² Cfr. *idem*, 947-948.

1.2.1. La aplicación de la mecánica cuántica al concepto de enlace químico

L. De Broglie propuso que no solo la luz tiene las propiedades duales de ondas y partículas, sino que también las partículas de la materia poseen propiedades ondulatorias. Por tanto, para describir las propiedades de la materia, así como las de la luz, las ondas y los corpúsculos deben referirse uno al otro y al mismo tiempo. El electrón ya no puede ser concebido, como una pequeña partícula eléctrica; debe asociarse a una onda; la longitud de la misma puede ser medida y sus interferencias pueden predecirse.²³

El objeto fundamental de la química cuántica es describir, según el formalismo matemático de la mecánica cuántica, la estructura interna de los átomos y las moléculas. Aunque la noción de enlace químico ha sido un concepto fundamental anterior al desarrollo de la mecánica cuántica, actualmente los químicos explican el hecho del enlace adoptando la noción de interacción orbital, que es una aplicación a la química de la mecánica ondulatoria.²⁴

La química cuántica se desarrolló inicialmente con el propósito de explicar la unión homopolar, fenómeno que constituía una de las dificultades de la teoría clásica de Lewis. Para esto se utilizó la ecuación cuántica del estado estacionario, conocida también como ecuación de E. Schrödinger.

La ecuación de Schrödinger funciona bien para el átomo de hidrógeno (con un protón y un electrón), pero no puede resolverse con exactitud para el caso de átomos que tengan más de un electrón. Los químicos y los físicos han debido superar esta dificultad con métodos de aproximación, los cuales contienen algoritmos particulares que permiten generar las funciones de onda características tanto de la teoría del enlace de valencia como de la teoría del orbital molecular.²⁵

En el caso de la teoría del enlace de valencia, los electrones de los átomos que constituyen las moléculas tienen una ubicación localizada, es decir, se encuentran asociados a un núcleo particular. Esta característica aparece reflejada en la combinación lineal de las funciones de onda de los átomos de las moléculas. En cambio, en la teoría del orbital molecular — que considera a las moléculas como sistemas —, los electrones de los átomos que constituyen las moléculas ya no pueden ser localizados en torno a un único núcleo, sino que se encuentran deslocalizados en la molécula completa. De aquí que las funciones de onda que describen el

²³ Cfr. DE BROGLIE, L., *The Wave Nature of the Electron* en: http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1929/broglie-lecture.pdf [consultada el 24-IX-2015].

²⁴ Cfr. LOMBARDI, O. & MARTÍNEZ, J.C., *op. cit.*, 652.

²⁵ Cfr. CHANG, R. & GOLDSBY, K. A., *Química*, 11ª. ed., McGraw-Hill, México 2013, 297.

sistema deberán incluir componentes que asocian los mismos electrones con más de un núcleo.²⁶

La primera aplicación de la mecánica cuántica para explicar el enlace químico fue desarrollada en 1927 por W. Heitler y F. London y se ha convertido en un referente para trabajos posteriores.²⁷

Para construir la función de onda que permita resolver la ecuación de Schrödinger, estos autores toman como punto de partida el caso clásico de enlace covalente que es el de la molécula de hidrógeno, a la cual consideran como un sistema compuesto de dos núcleos y dos electrones completamente separados. La molécula de H₂ se forma por la superposición de las funciones de onda de los electrones de los respectivos átomos de hidrógeno. La superposición produce un aumento en la densidad electrónica en la región entre los dos núcleos formándose un enlace sigma (σ).²⁸ A medida en que los dos átomos de H se aproximan entre sí y se produce el solapamiento de los orbitales, los electrones se convierten en partículas indistinguibles.²⁹

Como acabamos de señalar, aunque la demostración de la naturaleza mecánico-cuántica del enlace químico fue realizada por Heitler y London, sin embargo, fue Pauling quien relacionó este método con las estructuras estáticas propuestas por Lewis, interpretando los estados mecánico-cuánticos de la molécula como las superposiciones de los estados correspondientes a las estructuras clásicas.³⁰

El éxito de la versión mecánico-cuántica de la teoría del enlace de valencia se debe a que permite interpretar, predecir y explicar de forma muy simple, propiedades importantes de las moléculas. Para el modelo del enlace de valencia, el apareamiento de los electrones alojados ya sea en orbitales atómicos o híbridos es lo que permite la unión entre dos átomos. Sin embargo, no todos los tipos de enlace ni todas las propiedades de las moléculas se pueden explicar adecuadamente mediante los modelos de enlaces localizados; un ejemplo bien conocido es el del benceno.³¹

1.2.2 La teoría del orbital molecular

Al mismo tiempo que se desarrollaba la teoría del enlace de valencia, F. Hund y R. Mulliken propusieron la teoría del orbital molecular, que surgió como un

²⁶ Cfr. LOMBARDI, O. & MARTÍNEZ, J.C., *op. cit.*, 653.

²⁷ Cfr. FISHER-HJALMARS, I., *op. cit.*

²⁸ El enlace sigma (σ) es el tipo más fuerte de enlace covalente y con mayor estabilidad. Se forma por hibridación de orbitales atómicos.

²⁹ Cfr. LOMBARDI, O. & MARTÍNEZ, J.C., *op. cit.*, 652-654.

³⁰ Cfr. *idem*, 654 y HENDRY, R. F., *op. cit.*, 914 y 917.

³¹ Cfr. ALCAÑIZ, E., *Enlace químico y estructura de la materia*, Universidad de Valencia, en: <http://www3.uah.es/ejesus/resumenes/EQEM.htm> [consultada el 1-octubre-2015].

enfoque alternativo para diseñar las funciones de onda para resolver la ecuación de Schrödinger para una molécula. En la mecánica cuántica, el término orbital designa la función orbital para la solución de la ecuación de Schrödinger de un electrón, basada en la atracción del núcleo sobre el electrón más el promedio de la repulsión de los demás electrones. La teoría del orbital molecular considera que los orbitales moleculares pertenecen a la molécula como a un todo más que como átomos individuales.

Cuando ocurre un enlace simple entre dos átomos, el par de electrones que forma el enlace ocupa un orbital molecular que es la combinación matemática de las funciones de onda de los orbitales atómicos de los dos átomos involucrados. Para calcular la función de onda de un electrón es necesario tener en cuenta que, si este se encuentra cerca de un núcleo particular dentro del sistema molecular, actúan sobre él tanto las fuerzas del núcleo como las de los electrones cercanos al mismo, por lo que es necesario asumir la función de onda de los otros electrones. La manera más apropiada para representar lo anterior es mediante una combinación lineal de orbitales atómicos para cada electrón. Esta función de onda se denomina orbital molecular, y a ello debe su nombre esta teoría³².

Los orbitales atómicos y los orbitales moleculares coinciden en varias de sus características. Por ejemplo, un orbital molecular puede contener como máximo dos electrones (con espines opuestos) y tiene una energía definida. Al igual que un orbital atómico es una función de onda que describe los electrones de los átomos, un orbital molecular es una función de onda que describe a los electrones de la molécula; sin embargo, a diferencia de los orbitales atómicos, los orbitales moleculares están asociados a la molécula entera y no a un solo átomo.³³

Resulta interesante señalar, desde otra perspectiva, la diferencia entre la teoría del enlace del orbital molecular y la teoría del enlace de valencia. Así como en la teoría del enlace de valencia, los electrones ocupan orbitales atómicos, en la teoría del enlace molecular los electrones ocupan orbitales moleculares. Al igual que un orbital atómico es una función de onda que describe los electrones de los átomos, un orbital molecular es una función de onda que describe a los electrones de la molécula; sin embargo, a diferencia de los orbitales atómicos, los orbitales moleculares están asociados a la molécula entera y no a un solo átomo.³⁴

³² Cfr. LOMBARDI, O. & MARTÍNEZ, J.C., *op. cit.*, 655 y MULLIKEN, R. S., "Spectroscopy, Molecular Orbitals, and Chemical Bonding", *Nobel Lecture*, en: http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1966/mulliken-lecture.pdf [consultada el 1-octubre-2015].

³³ Cfr. BROWN, TH. L. & LEMAY, JR., H. E. & BURSTEN, B. & BURDGE, J., *Química. La ciencia central*, 9a. ed., Pearson, México 2004, 343.

³⁴ Cfr. LOMBARDI, O. & MARTÍNEZ, J.C., *op. cit.*, 655-656 y MULLIKEN, R. S., *op. cit.*

§ 2. — ORBITALES Y ONTOLOGÍA EN LA FILOSOFÍA DE LA QUÍMICA

Como ya señalamos anteriormente, actualmente los químicos explican el hecho del enlace químico adoptando la noción de interacción orbital, que es una aplicación a la química de la mecánica ondulatoria.

La cuestión de la existencia actual de orbitales ha sido un tema de debate recurrente en la filosofía de la química desde la publicación, en septiembre de 1999, de un artículo en la revista *Nature* que, bajo el título *Orbitals observed*, anunciaba la visualización de orbitales moleculares.³⁵ A pesar del impacto, la acogida y la expectativa generados, algunos autores expresaron serias reservas con respecto a la interpretación de los experimentos mostrados. En particular, en el ámbito filosófico, se presentaron diferentes argumentos que señalaban un error conceptual en la interpretación de las visualizaciones.³⁶ Scerri, por ejemplo, insistió en que los orbitales no pueden ser visualizados porque son constructos matemáticos y no entidades de las que se pueda decir que existen físicamente. Y este hecho no se debe a limitaciones empíricas sino a que el término orbital carece de referencia: estrictamente los orbitales no existen. Según este autor, el error conceptual consiste en confundir el concepto de orbital con el de densidad de carga (o densidad electrónica) el cual sí es observable experimentalmente.³⁷

Scerri considera que el modelo orbital sigue siendo muy útil como una primera aproximación y se encuentra en la base de mucha de la química computacional. Sin embargo, no se puede perder de vista que se trata solamente de un modelo. De acuerdo con la teoría ampliamente aceptada, los orbitales atómicos sirven como una especie de sistema de coordenadas que puede ser utilizado para extender matemáticamente la función de onda de cualquier sistema físico particular. Así como el sistema de coordenadas x , y y z , que se utiliza para describir cualquier experimento particular en la física clásica, es inobservable, del mismo modo los orbitales atómicos son completamente inobservables.³⁸

El primer argumento utilizado por Scerri para negar la existencia de los orbitales se basa en una limitación matemática. De hecho, solamente el átomo considerado como un todo posee un estado cuántico bien definido, representado por su función

³⁵ ZUO, J. M. & KIM, M. & O'KEEFE, M. & SPENCE, J.C.H., "Direct observation of d -orbitals holes and Cu-Cu bonding in Cu_2O ", *Nature*, No. 401 (1999), 49-52.

³⁶ Cfr. por ejemplo: SCERRI, E., "Have Orbitals Really Been Observed?", *Journal of Chemical Education*, Vol. 77, No. XX (2000), 1492-1494; SCERRI, E., "The Recently Claimed Observation of Atomic Orbitals and Some Related Philosophical Issues", *Philosophy of Science*, Vol. 68, No. 3 (2000), S76-S88.

³⁷ Cfr. LABARCA, M. & LOMBARDI, O., "Acerca del status ontológico de las entidades químicas. Nuevos argumentos en favor de la autonomía ontológica del mundo químico", *Revista Colombiana de Filosofía de la Ciencia*, Vol. 13, No. 26 (2013), 318-319.

³⁸ Cfr. SCERRI, E., "Have Orbitals Really Been Observed?", *op. cit.*, 523 y HETTEMA, H., *Reducing Chemistry to Physics. Limits, Models, Consequences*, Rijksuniversiteit Groningen, Groningen 2012, 353.

de onda total; dicho estado resulta de las interacciones entre el núcleo y cada electrón, y de los electrones entre sí. Una consecuencia de las interacciones entre los electrones es que no es posible factorizar la función de onda del átomo como producto de las funciones de onda de los electrones componentes: toda descomposición de este tipo es una mera aproximación. En otras palabras, como la ecuación de Schrödinger no puede ser resuelta analíticamente para átomos multielectrónicos, no es posible asignar una función de onda individual a cada electrón. Bajo este supuesto, el autor considera que los orbitales son no referenciales en cuanto que no se corresponde con cualquier entidad que se puede decir que existe físicamente. La utilidad de los orbitales se limita, entonces, a proporcionar una base en la cual la función de onda pueda expresarse matemáticamente; la precisión dependerá de las posibilidades de cálculo disponibles.³⁹

El segundo argumento se basa en el hecho de que, según la mecánica cuántica, los electrones carecen de una trayectoria definida. Su función de onda no describe su trayectoria, sino que, más bien, permite calcular una distribución de probabilidad. Por tanto, si se admite que un orbital es una función de onda, y dado que la función de onda es una magnitud imaginaria (incluye el número imaginario $i = \sqrt{-1}$), entonces los orbitales no son observables.⁴⁰

Con el anuncio de la observación de orbitales, la discusión pasa del terreno epistemológico al ontológico: ya no se trata de establecer el papel explicativo del concepto de orbital, o la posibilidad de su descripción en términos de la mecánica cuántica, sino de saber si los orbitales existen o no.⁴¹

Lombardi y Labarca critican la postura de Scerri argumentando que del carácter no referente de los orbitales no puede concluirse que no existan. Más aún, según estos autores, la no referencialidad del término orbital depende de un profundo rompimiento conceptual entre la noción de orbital, tal y como se entiende en la mecánica cuántica, y la noción de orbital como es usada en la química molecular.⁴² Mientras que en la mecánica cuántica el orbital es un término no referente (el orbital atómico es una función de onda y, por tanto, un ítem matemático que no posee un referente ontológico), en la química molecular los orbitales existen como regiones espaciales que permiten dar cuenta, por ejemplo, de los enlaces entre los átomos y la estructura de las moléculas.⁴³ Es decir, los orbitales no existen en el mundo

³⁹ Cfr. LABARCA, M. & LOMBARDI, O., "Acerca del status ontológico de las entidades químicas...", *op. cit.*, 319-321 y LABARCA, M. & LOMBARDI, O., "Why Orbitals Do Not Exist?", *Foundations of Chemistry*, No. 12 (2010), 150-151.

⁴⁰ Cfr. LABARCA, M. & LOMBARDI, O., "Acerca del status ontológico de las entidades químicas...", *op. cit.*, 319

⁴¹ Cfr. *ibidem*.

⁴² Cfr. HETTEMA, H., *Reducing Chemistry to Physics. Limits, Models, Consequences*, *op. cit.*, 355.

⁴³ Cfr. *ibidem*.

descrito por la mecánica cuántica pero sí existen en el mundo descrito por la química molecular.⁴⁴

Labarca y Lombardi concluyen que sostener la idea de que los orbitales no existen se basa en un reduccionismo metafísico que da primacía a la mecánica cuántica y que no tiene en cuenta la legitimidad de la química como ciencia *a priori*. Esta conclusión va de acuerdo con el pluralismo ontológico sostenido por estos autores, que admite la existencia igualmente real de diferentes ontologías sin relaciones de prioridad o independencia entre ellas. Dado que, según Lombardi y Labarca, toda ontología surge de la síntesis entre la realidad nouménica y el esquema conceptual, se puede sostener tanto una ontología propia de la mecánica cuántica como una ontología propia de la química molecular. De aquí que no haya inconveniente en afirmar que la forma molecular y los enlaces químicos existen en la ontología de la química molecular, aunque no existan en la ontología cuántica. Según estos autores, las entidades químicas no necesitan de las entidades cuánticas para legitimar su existencia. Por tanto, a la pregunta ¿los orbitales pueden ser observados?, Labarca y Lombardi responden afirmativamente. Los orbitales pueden ser observados de manera semejante a otras entidades no pertenecientes a la ontología cuántica.⁴⁵

Hettema critica las conclusiones pluralistas de Labarca y Lombardi. Para este autor, el problema está en que parece haber una discontinuidad ontológica entre el uso del término orbital en la química molecular y en la mecánica cuántica. Según Hettema no podemos describir a los orbitales como las regiones espaciales de los átomos en las que la localización de los electrones es más probable; este papel le correspondería a la densidad electrónica. De aquí que lo que podríamos observar no son los orbitales sino la densidad electrónica u otro efecto del orbital. Para Hettema, hay una noción dual del concepto de orbital: una noción de orbital que depende del marco ontológico de las diversas teorías, y una noción de orbital según su función en una explicación química. Es decir, mientras que para algunos los orbitales son funciones matemáticas, para otros tienen que ver más con su función explicativa. De aquí que, para Hettema, la pregunta no es si los orbitales existen, sino cómo o como qué existen.⁴⁶

⁴⁴ Cfr. LABARCA, M. & LOMBARDI, O., “Acerca del status ontológico de las entidades químicas...”, *op. cit.*, 325.

⁴⁵ Cfr. HETTEMA, H., *Reducing Chemistry to Physics. Limits, Models, Consequences*, *op. cit.*, 355 y LABARCA, M. & LOMBARDI, O., “Acerca del status ontológico de las entidades químicas...”, *op. cit.*, 326.

⁴⁶ Cfr. HETTEMA, H., *Reducing Chemistry to Physics. Limits, Models, Consequences*, *op. cit.*, 362-363.

CONCLUSIÓN. LA CUESTIÓN DE LA REALIDAD OBJETIVA DE LOS MODELOS MOLECULARES

Que la realidad química existe, es un hecho. El desarrollo de la química hasta su constitución como ciencia moderna culmina con el aislamiento y la identificación de lo que ahora podemos llamar especies químicas. La experiencia química establece la realidad de una discontinuidad entre dichas especies lo que constituye la evidencia inicial a partir de la cual, y a propósito de la cual, la inteligibilidad química puede tener sentido. Y es también, a partir de esta realidad concreta, que se intenta precisar la correspondencia entre modelo molecular y entidad química. De lo contrario, la modelización molecular se reduciría a un simple instrumento intelectual que permitiría reagrupar un conjunto de observaciones realizadas en un momento dado bajo condiciones físicas determinadas.

Como hemos tenido ocasión de señalar, tanto los diversos desarrollos del concepto de enlace químico como el de orbitales moleculares están vinculados con la utilización de modelos que permiten la descripción de sus propiedades y comportamiento.

A pesar de que existe una diversidad de modelos que depende de los fenómenos estudiados y las posibilidades de conceptualización y experimentación dadas, hay dos características básicas que deben darse en todos los modelos: la referencia y la significación. Los modelos hacen referencia a aspectos concretos de la realidad la cual, a su vez, está condicionada por el modo de especificar las características del modelo: lo que propiamente se estudia en la teoría es el modelo ideal, cuyas propiedades se definen por medio de conceptos teóricos. El modelo tiene una significación que se determina teóricamente, y una referencia a la realidad cuyo valor debe juzgarse comparando las conclusiones alcanzadas como consecuencia de la utilización del modelo con los resultados de la experimentación. Es decir, además de formular las definiciones teóricas oportunas, se deben mostrar las prácticas experimentales que proporcionan la base empírica necesaria para la aplicación del modelo; siempre ha de ser posible valorar la correspondencia entre los modelos y los datos experimentales.

¿Cuál es, pues, el estatuto ontológico del enlace químico y de los orbitales moleculares? ¿Son entidades reales? De acuerdo con lo señalado anteriormente, la pregunta no es tanto si estas entidades existen, sino cómo o como qué existen. En el marco de la química molecular, el concepto de enlace hace referencia a una relación de causa efecto entre fuerzas e interacciones; bajo la perspectiva de la mecánica cuántica, los químicos explican el hecho del enlace adoptando la noción de interacción orbital. Tanto el enlace químico como los orbitales manifiestan que las entidades naturales poseen un dinamismo y estructuración propias que son, en definitiva, aspectos que caracterizan la realidad natural. Por tanto, cuando el

químico habla de entidades químicas pretende referirse a aspectos reales de la naturaleza; las construcciones teóricas son el instrumento mediante el cual se busca conocer la realidad, aunque no son meras traducciones de la misma.

Con lo anterior, lo que quiero decir es que, por lo que se refiere a las entidades químicas, en muchos casos ha sido posible obtener demostraciones rigurosas de su existencia, como es, por ejemplo, el caso de los elementos y de las moléculas, aunque esto no equivalga a considerarlas como algo perfectamente comprendido y definitivamente establecido en todos sus detalles. A pesar de que se consiga establecer la realidad de ciertas entidades químicas, siempre hay que tener en cuenta su marco contextual y que, por tanto, se trata de una realidad que es conocida parcialmente, bajo determinados aspectos, y que permanece abierta a determinaciones más precisas.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALCAÑIZ, E., *Enlace químico y estructura de la materia*, Universidad de Valencia, en: <http://www3.uah.es/eJesus/resumenes/EQEM.htm> [consultada el 1-octubre-2015].

ARTIGAS, M., *La inteligibilidad de la naturaleza*, 2ª. ed, EUNSA, Pamplona 1995.

——— *Filosofía de la ciencia*, 2ª. ed, EUNSA, Pamplona 2009.

BERSON, J. A., “Molecules with Very Weak Bonds: The Edge of Covalency”, *Philosophy of Science*, Vol. 75, No. 5 (2006), 947-957.

BROWN, TH. L. & LEMAY, JR., H. E. & BURSTEN, B. & BURDGE, J., *Química. La ciencia central*, 9a. ed., Pearson, México 2004.

CONTRERAS GARCÍA, J. & OTERO-DE-LA-ROSA, A. & RECIO, J. M., “El enlace químico y su supervivencia en la química cuántica”, *Anales de Química*, Vol.110-2 (2014), 113-120.

COULSON, CH. A., *Early Ideas in the History of Quantum Chemistry* en: <http://www.quantum-chemistry-history.com/Coulson1.htm> [consultada el 17-IX-2015].

DE BROGLIE, L., *The Wave Nature of the Electron* en: http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1929/broglie-lecture.pdf [consultada el 24-IX-2015].

FISHER-HJALMARS, I., *Presentation Speech to R. Mulliken Nobel Prize in Chemistry (1966)*, “Nobelprize.org”. Nobelprize.org. Nobel Media AB 2014, en:

http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1966/press.html [consultada el 22-IX-2015].

HENDRY, R. F., "Two Conceptions of the Chemical Bond", *Philosophy of Science*, Vol. 75, No. 5 (2008), 909-920.

HETTEMA, H., *Reducing Chemistry to Physics. Limits, Models, Consequences*, Rijksuniversiteit Groningen, Groningen 2012.

JENSEN, W. B., "The Traité of the Third Chemical Revolution. A Tribute to 'Valence and the Structure of Atoms and Molecules'", en: <http://www.che.uc.edu/jensen/W.%20B.%20Jensen/Unpublished%20Lectures/Chemistry/05.%20G.%20N.%20Lewis%201'.pdf> [consultada el 17-IX-2015].

LIVAGE, J., "El Enlace Químico", en ANDRÉS, J. & ANGLÉS, M. A. & OPIS, R. & NIEVES, M. & REMIRO, F., *Introducción a los modelos de enlace químico*, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia 1993, 112-118.

LABARCA, M. & LOMBARDI, O., "Why Orbitals Do Not Exist?", *Foundations of Chemistry*, No. 12 (2010), 149-157.

LOMBARDI, O., "¿Acerca de qué nos habla la química? Nuevos argumentos en favor de la autonomía ontológica del mundo químico", *Revista Colombiana de Filosofía de la Ciencia*, Vol. 13, No. 26 (2013), 105-144.

——— & MARTÍNEZ, J.C., "Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué se refiere la química cuántica?", *Scientiae Studia*, Vol. 10, No. 4 (2012), 649-670.

MANFREDI, A., *Le caractère holistique des systèmes matérielles en chimie moléculaire*, Thesis ad Doctorandum in Philosophia totaliter edita, Pontificia Università della Santa Croce, Romae 2003.

MULLIKEN, R. S., "Spectroscopy, Molecular Orbitals, and Chemical Bonding", *Nobel Lecture*, en: https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1966/mulliken-lecture.pdf [consultada el 1-octubre-2015].

NEEDHAM, P., "The Source of Chemical Bonding", *Studies in History and Philosophy of Science*, No. 45 (2014), 1-13.

PAULING, L., *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, 3a. ed., Cornell University Press, New York 1960, 5-7.

ROSEMBERG, J. & EPSTEIN, L. M. & KRIEGER, P. K., *Química*, 10ª. ed., Mac Graw Hill, México 2013.

SCERRI, E., "Have Orbitals Really Been Observed?", *Journal of Chemical Education*, Vol. 77, No. XX (2000), 522-525.

——— “The Recent Claimed Observation of Atomic Orbitals and Some Related Philosophical Issues”, *Philosophy of Science*, Vol. 68, No. 3 (2000), S76-S88.

WEISBERG, M., “Challenges to the Structural Conception of Chemical Bonding”, *Philosophy of Science*, No. 75 (2008), 932-946.

ZUO, J. M. & KIM, M. & O’KEEFE, M. & SPENCE, J.C.H, “Direct observation of *d*-orbitals holes and Cu-Cu bonding in Cu₂O”, *Nature*, No. 401 (1999), 49-52.

* * *

Gabriela GARCÍA ZERECERO
Universidad Panamericana, México
gagarcia@up.edu.mx