

FÍSICA E QUÍMICA**LA TOPOLOGÍA DE UN ÁTOMO EN UN SISTEMA MOLECULAR: ¿QUÉ CONCEPTOS TIENEN O PODRÍAN TENER FÁCILMENTE NUESTROS ALUMNOS?****GÓMEZ DE TOJEIRO RODRÍGUEZ, José M.***IES Lama das Quendas - CHANTADA***MOSQUERA CASTRO, Ricardo****PARDO REGUEIRO, J.M.**

UNIVERSIDADE DE VIGO

VILA VILARIÑO, Antonio*IES Lama das Quendas / UNIVERSIDADE DE VIGO*

Desde Dalton hasta el concepto de átomo en una molécula. La hipótesis atómica de Dalton (1807) marca el nacimiento de la Química como una rama de la Ciencia. Dalton no recupera simplemente la idea del átomo acuñada por los griegos, sino que postula que su identidad persiste cuando se combinan con otros átomos para formar moléculas. Hacia finales del siglo XIX las ideas de Dalton evolucionan hacia el concepto de estructura molecular (la molécula es una colección de átomos unidos por un conjunto de enlaces a los que ésta debe su estructura). Dalton propuso, además, que cada átomo tenía una masa particular cuyo valor era independiente de su estado químico. La verificación de tal idea tuvo que esperar a los experimentos de Rutherford y su concepto de átomo nuclear en el que la masa se encuentra en un núcleo químicamente estable. Puesto que la carga positiva se concentra en un punto dado del átomo, las fuerzas atractivas (desde el punto de vista de los electrones) son las fuerzas dominantes en un sistema molecular. El núcleo juega por tanto un papel determinante, el de atractor, en la distribución de carga electrónica de un sistema molecular; proporcionando la definición de átomo en la molécula.

La Mecánica Cuántica [1] nos proporciona la función de onda electrónica de la molécula como sistema, y su interpretación probabilística la densidad de carga ρ . El gradiente de la densidad de carga, dado por la operación

$$\nabla\rho = \frac{\partial\rho}{\partial x}i + \frac{\partial\rho}{\partial y}j + \frac{\partial\rho}{\partial z}k$$

nos permite definir la “porción” de espacio molecular asignada a cada átomo. La Figura 1 muestra una representación del gradiente de la densidad de carga para la molécula de agua en el plano que contiene a los núcleos. Cada núcleo actúa como atractor de las líneas de campo que terminan en él, definiendo así el espacio físico de los átomos de hidrógeno y oxígeno(O, H). La observación de que las líneas de campo no atraviesan desde la cuenca de un átomo a la de otro vecino permite definir al átomo en una molécula mediante la condición matemática de superficie de flujo cero en el gradiente de la densidad de carga [2] (nótese que los “límites exteriores” cumplen esta condición si se establecen a partir de un valor virtualmente nulo de la densidad de carga). Mencionar, finalmente, que se ha llevado a cabo una aplicación sistemática de esta teoría en éteres de alquilo, obteniendo conclusiones con profunda implicación química [3-6].

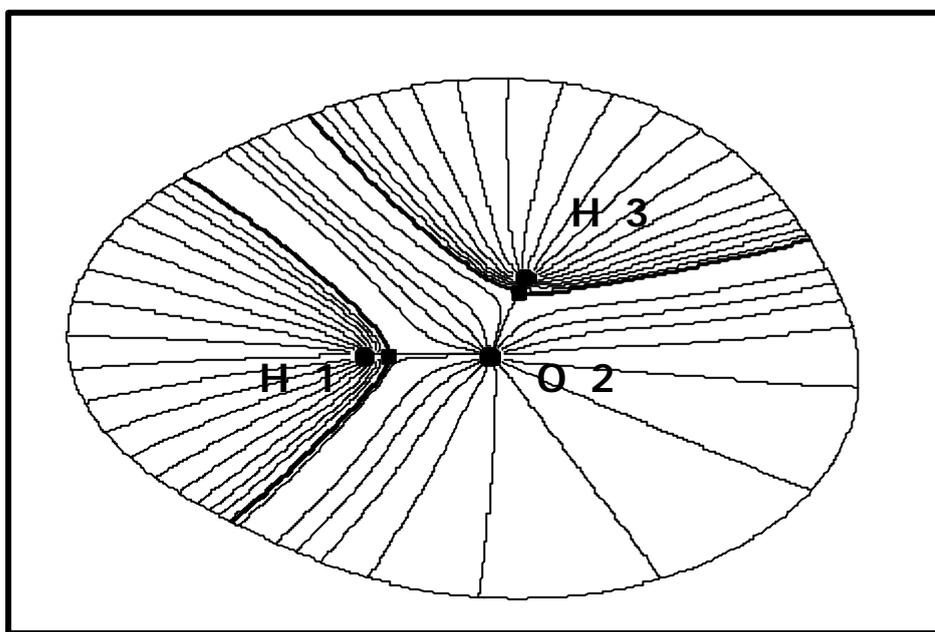


Figura 1

Nuestros alumnos. Los contenidos curriculares de las asignaturas de Física y Química (especialmente del Bachillerato) tratan con suficiente detalle los aspectos históricos del concepto atómico (Dalton, etc.). En lo que se refiere a la relativamente moderna teoría de átomos en moléculas, no hemos encontrado ningún texto de Bachillerato que la mencione. Entendemos que, de manera superficial, como se hizo aquí, podría incluirse como una breve reseña al final de alguno de los temas de estructura química.

Nos ha parecido oportuno, en este sentido, averiguar los conceptos que poseen nuestros alumnos del IES "Lama das Quendas" relativos a la noción de átomo y estructura molecular. Pretendemos determinar también si hay algún tipo de dificultad (de aparato matemático o abstracción) para comprender la noción de átomo en una molécula. Estos resultados junto con su evolución con el nivel académico forman parte de nuestra comunicación en formato cartel.

BIBLIOGRAFÍA

- R. Eisberg, R. Resnick, "Quantum Physics", John Wiley and Sons, **1985**.
- R. F. W. Bader, "A quantum theory of molecular structure and its applications", *Chemical Reviews*, **1991**, *91*, 893.
- A. Vila; E. Carballo; R. A. Mosquera, "AIM study on the transferability of the oxygen atom in linear alkyl ethers", *Canadian Journal of Chemistry*, **2000**, *78*, 1535.
- A. Vila; R. A. Mosquera, "Transferability in alkyl monoethers. II. Methyl and methylene fragments", *Journal of Chemical Physics*, **2001**, *115*, 1264.
- A. Vila; R. A. Mosquera, "Topological analysis of fluorinated dimethyl ethers and their protonated forms", *Journal of Physical Chemistry A*, **2000**, *104*, 12006.
- A. Vila, R. A. Mosquera, "An electron density analysis of the proximity effect in linear alkyl diethers", *Chemical Physics Letters*, **2001**, *345*, 445.