

Correspondencia de y para los lectores

☐ Crítica al artículo sobre resonancia de Haro *et al.*

San Carlos de Bariloche, 2 de mayo de 2005

Estimado Editor de la Revista *Educación Química*

Prof. Andoni Garritz-Ruiz

Recientemente se ha publicado en *Educación Química* un artículo (Haro-Castellanos *et al.*, 2004) que incurre en una serie de errores conceptuales sobre el significado de la resonancia. A continuación extractamos los pasajes relevantes de dicho artículo, junto con el correspondiente comentario.

“...La resonancia se define como la deslocalización de los electrones pi y electrones libres (electrones no enlazantes) en una molécula...”

Esta afirmación no es excluyente. La polaridad de una molécula como HCl, la cual no posee enlaces pi, se puede describir con base en la resonancia iónico-covalente (Pauling, 1965) [$\text{HCl} \leftrightarrow \text{H}^+\text{Cl}^-$], en la que la primera estructura hace la mayor contribución.

“...existen diferentes tipos de errores no sólo en la expresión de algunas de las reglas de resonancia, sino en general del tema de la resonancia, que es vasto. Para ejemplificar lo anterior, no pocos libros de texto, de los que se publicaron posteriormente al año 1988, todavía niegan la existencia de las estructuras resonantes con expresiones como «Las estructuras de resonancia sólo existen en el papel» (Solomons, 1988), o «Las formas individuales de resonancia son imaginarias: no son reales (Mc Murry, 2001), aun cuando ya se habían publicado fotografías de las formas resonantes del benceno (Greek, 1988)»...”

La esencia de estas observaciones encierra un error conceptual importante. Lo que los autores señalan como errores, no son tales. Las estructuras de resonancia o contribuyentes son distribuciones electrónicas, extremas e ideales, que no poseen existencia real. La resonancia es una extensión de la teoría de enlace de valencia para describir moléculas que no admiten como representación apropiada una única estructura electrónica de Lewis. Tomemos como ejemplo la molécula de benceno. Los cinco contribuyentes frecuentemente empleados (dos estructuras tipo Kekulé y tres estructuras tipo Dewar) no poseen existencia real, y sus geometrías no se corresponden con aquellas fijadas por el correspondiente esquema de apareamiento. Es decir, todas las estructuras contribuyentes del benceno (las cinco mencionadas y todas las posibles de plantear adicionalmente) tienen la geometría

hexagonal regular (que es la de la molécula de benceno). Una estructura tipo Kekulé no posee la geometría hexagonal irregular de enlaces largos C–C y cortos C=C alternados, la cual correspondería a la del 1,3,5-ciclohexatrieno (CHT) y, tampoco, una estructura tipo Dewar posee la geometría no plana del biciclo [2.2.0] hexa-2,5-dieno (BHD). El BHD (mal llamado benceno Dewar) ha sido sintetizado en piridina (Potgeiter, 1991), posee una vida media de unos dos días, y se transforma a benceno. Pero ni aún en este caso, el BH es un contribuyente tipo Dewar. Por lo tanto, no cabe ninguna posibilidad de tener moléculas reales con la estructura de algún contribuyente del benceno. Los autores hacen referencia a una fotografía de microscopía de barrido por efecto túnel (STM) publicada como un recuadro en la misma página que el artículo de Greek –casualmente una reciente editorial de *Educación Química* hace referencia a esta técnica (Garritz, 2004)–. El trabajo original (Ohtani *et al.*, 1988) es una investigación de la coadsorción de benceno con monóxido de carbono sobre una superficie cristalina de rodio. En una de las imágenes STM mostradas se observa que, tal como había sido detectado un año antes a partir de mediciones de difracción de electrones de baja energía (Lin *et al.*, 1987), las moléculas de benceno sufren una distorsión adquiriendo una geometría de enlaces CC cortos y largos alternados, pero cuyas longitudes no coinciden con las de los enlaces C=C y C–C, respectivamente. Esta distorsión no constituye una molécula de benceno aislada. Los orbitales de la molécula de benceno adsorbida interactúan con los del rodio, por lo que no se trata de un estado estable para esta molécula. Entonces, de acuerdo con lo mencionado, esta molécula distorsionada no puede ser identificada, ni como estructura de Kekulé (por no poseer geometría hexagonal regular), ni como molécula de CHT (por no poseer su geometría ni constituir una molécula aislada). En estas investigaciones (Lin *et al.*, 1987; Ohtani *et al.*, 1988) a la molécula distorsionada de benceno adsorbida se la llama (lamentablemente) distorsión de Kekulé, lo cual puede inducir al error, aunque en el recuadro citado por Haro-Castellanos *et al.* no se hace esta mención y, mucho menos, en ninguno de los artículos que muestran las imágenes de STM se menciona que se haya fotografiado estructuras contribuyentes del benceno. Suponemos, entonces, que dicha afirmación es una conclusión de Haro-Castellanos *et al.* Es más, la estructura de la molécula de benceno adsorbida podrá ser descrita como un híbrido de resonancia a partir de contribuyentes apropiados (todos de geometría idéntica a la distorsión mencionada) que, además, deberán incluir la unión entre la molécula de benceno y los átomos de rodio.

“...[Las reglas de prioridad] nos conducen a determinar cuál de ellas [las estructuras contribuyentes] es más abundante... Estas reglas [de prioridad] responden a la pregunta: ¿cuál de las estructuras resonantes “A”, “B”, “C”, etcétera, se encuentra en mayor proporción?...”

Con estas afirmaciones, más la declaración sobre de la existencia real de las estructuras contribuyentes, se induce a pensar (si no es que se dice directamente) que una sustancia cuyas moléculas son descriptas como un híbrido de resonancia, está constituida por una mezcla de estructuras contribuyentes en cantidades proporcionales a su grado de contribución, lo cual es incorrecto.

Como comentario final queremos decir que la resonancia es uno de los temas de química en el que se manifiestan de manera más clara los efectos nocivos del encuentro entre las ideas previas de los alumnos y las explicaciones extremadamente simplificadas (Andrade-Gamboa y Donati, 2005). En cursos básicos de química, debido a que no se puede recurrir a las expresiones matemáticas de la química cuántica, es difícil explicar el concepto de resonancia. Por ello, para evitar errores conceptuales resulta efectivo relatar lo que la resonancia no es. En el artículo cuestionado en la presente carta, los autores están dando por válidos los hechos que son los ejemplos más claros de dar para destacar lo que no significan las estructuras contribuyentes.

Julio Andrade-Gamboa

Área de Química, Centro Regional de Energía Atómica, Universitario Bariloche, Universidad Nacional del Comahue y Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional, Av. Bustillo Km 9.500, R8402AGP San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina

Edgardo R. Donati

Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, 47 y 115 (1900) La Plata, Argentina, donati@quimica.unlp.edu.ar

Bibliografía

- Andrade-Gamboa, J., Donati, E. R. El concepto de resonancia: confusiones ontológicas y epistemológicas. Enviado a *Educación Química*, 2005.
- Garriz, A. Número extraordinario, *Educ. quim.*, 15, 318-320, 2004.
- Haro-Castellanos, J. A., Ramírez-Chavarín, N. L., Arias-Margarito, L., Canchota-Martínez, E., James-Molina, G., Romero-Martínez, A, Reglas de resonancia, *Educ. quim.*, 15[4], 446-450, 2004.
- Lin, R. F., Blackman, G. S., Van Hove, M. A., Somorjai, G. A. LEED Intensity Analysis of the Structure of Adsorbed Benzene and CO on Rh(111), *Acta Cryst.*, B43, 368-376, 1987.
- Ohtani, H., Wilson, R. J., Chiang, S., Mate, C. M., Scanning Tunneling Microscopy Observations of Benzene Molecules on the Rh(111)-(3x3) (C₆H₆ + 2CO) Surface, *Phys. Rev. Lett.*, 60, 2398-2401, 1988.
- Potgeiter, J. H. The diverse nature of the C₆H₆ molecule., *J. Chem. Educ.* 68[4], 280-281, 1991.

Pauling, L. *Uniones químicas y la estructura de moléculas y cristales. Una introducción a la química estructural moderna*. Editorial Kapelusz, Buenos Aires, 1965, p. 68.

Réplica de los autores:

México, D. F. 31 de mayo de 2005.

Dr. Andoni Garriz Ruiz

Editor de la Revista *Educación Química*

Presente.

En relación a las observaciones hechas por los profesores. Julio Andrade y Edgardo R. Donati al artículo “Reglas de resonancia” (Haro y colaboradores) publicado en la Revista *Educación Química*, vol. 15, número 4, 446-450, del año 2004, queremos hacer las siguientes precisiones:

1. Para la primera observación:

En el área de la química orgánica introductoria orientada a los primeros niveles de las licenciaturas con ella relacionadas, la resonancia es una herramienta para manejar algunos mecanismos de reacción y explicar la formación preferente de algunos productos. Como en la enseñanza de cualquier tema el uso de simplificaciones contribuye a la mejor comprensión de los mismos y es por esto que en el artículo consideramos solamente la resonancia de los compuestos orgánicos, en la cual los electrones involucrados en la deslocalización son los electrones pi y los no enlazantes (libres).

2. Para la segunda observación:

Existe una contradicción en los libros cuando se dice que las estructuras resonantes no son reales y sin embargo se utilizan cotidianamente para representar los mecanismos de reacción y en algunos otros esquemas, lo cual crea confusión en los estudiantes de los primeros niveles en el aprendizaje del tema.

3. Para la tercera observación:

Como ya se expresó anteriormente, el tema de la resonancia en química orgánica es una herramienta que contribuye a explicar productos preferentes en una transformación en donde el mecanismo de reacción tiene vías alternativas para dar diferentes productos. Por tal razón, en los libros se recurre nuevamente a las estructuras resonantes de los intermediarios para explicar dichas preferencias y si se utilizan, no se le puede decir al alumno que no existen.

Los autores:

Jorge A. Haro Castellanos, N. Leticia Ramírez Chavarín, Ladislao Arias Margarito, Enrique Canchoila Martínez, Guillermo James Molina y Artemisa Romero Martínez.