

INFLUENCIA DE LAS TERMINOLOGÍAS DE LA TEORÍA DE BANDAS SOBRE LA APARICIÓN DE DESCONCEPTOS REFERIDOS A LAS PROPIEDADES DE LOS METALES

Oscar H. Pliego, Cristina S. Rodríguez, Liliana Contini (*), Stella M. Juárez

Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura. Universidad Nacional de Rosario. Avda. Pellegrini 250. Rosario. Argentina. E. mail: pliego@fceia.unr.edu.ar

(*) Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas. Universidad Nacional del Litoral. Paraje El Pozo. Ciudad Universitaria. Santa Fe. Argentina.

Resumen

El objetivo de este trabajo es comparar las frecuencias de aparición de un desconcepto según la terminología utilizada en la aplicación de la Teoría de Bandas de Sólidos. Para ello, en la presentación del tema “enlace metálico”, se aplicó la terminología habitualmente usada, Orbitales de Banda de Valencia (OBV) y Orbitales de Banda de Conducción (OBC) y la que es propia a la Teoría de Orbitales Moleculares (orbitales enlazantes, OB^b , orbitales antienlazantes, OB^*). El desconcepto cuya frecuencia se investiga es: “a los metales con mayor cantidad de electrones de valencia en los orbitales de la banda de conducción corresponden mayores valores de conductividad eléctrica”.

El trabajo fue desarrollado con la totalidad de los estudiantes ($n = 216$) del curso de Química, en el segundo semestre del año 2008. La frecuencia de aparición del desconcepto fue medida en la primera evaluación de acreditación de la asignatura a la que los alumnos arribaron con el conocimiento de la Teoría de Bandas aplicada a los metales pudiendo utilizar libremente cualquiera de las dos terminologías.

Los resultados obtenidos muestran que el desconcepto aparece con menor frecuencia en los estudiantes que utilizan la terminología propia de la Teoría de Orbitales Moleculares. Como ésta puede extenderse a todos los cristales con enlaces químicos deslocalizados, los resultados aquí obtenidos podrían estar indicando la conveniencia de utilizar en los cursos básicos de Química la terminología aquí propuesta no solamente para los metales, sino también para los aisladores y semiconductores con las características estructurales mencionadas.

Introducción

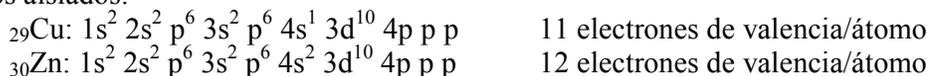
En los cuatro cursos desarrollados en los años 2006 y 2007, fuimos tomando conciencia de que los estudiantes, dentro del marco conceptual de la teoría de bandas, mostraban ciertos desconceptos, siendo el más frecuente de ellos la asignación de mayor valor de conductividad a los metales con mayor cantidad de electrones de valencia en los orbitales de banda de mayor energía.

Uno de los objetivos de los cursos básicos de Química es explicar porqué los metales son buenos conductores de la electricidad, pero, contrariamente, no es el objetivo de los mismos, ni es pertinente en nuestro marco institucional, deducir qué metal es mejor conductor que otro. Sin embargo, la toma de conciencia antes mencionada impactó fuertemente en nosotros ya que, si bien no es un objetivo del curso que el alumno deduzca o explique el mejor carácter conductor de un metal que otro, no podíamos aceptar la presencia de este desconcepto que, de seguro, significarían en las asignaturas posteriores mayores inconvenientes conceptuales.

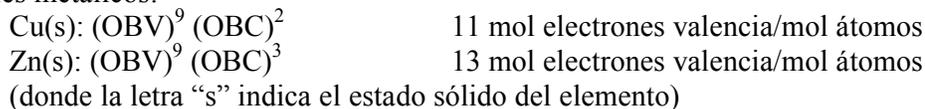
La Teoría de Bandas, extensión de la teoría de orbitales moleculares (TOM), puede ser aplicada con éxito a los sólidos cristalinos con enlaces químicos extendidos, a saber, metales, redes covalentes y compuestos iónicos (Kremer C., 2000, 2001, 2002; American Chemical Society, 2005; Atkins P., Jones L., 2006). Según ésta, producto de la combinación lineal de los niveles de energía de los electrones de valencia de los átomos individuales, “aparece” en el cristal una enorme cantidad de niveles de energía muy próximos. Son tantos, y de valores de energía tan próximos, que su representación tiene la forma de bandas de niveles de energía. Cada banda de energía está compuesta por un número de orbitales (denominados Orbitales de Banda, OB) numéricamente igual al número de orbitales atómicos, OA, que le dieron origen. De todas las bandas de energía que se forman, solamente interesa estudiar la de los niveles más altos. Ésta, a su vez, puede dividirse,

según la energía, en dos subgrupos. En la bibliografía generalmente usada en los cursos básicos de Química en su versión española (Chang, 2007; Whitten et al., 1992), así como también en los textos difundidos por las páginas web (ver referencias bibliográficas), a los niveles de menor energía de esta banda se los agrupa con la denominación de “orbitales de banda de valencia, OBV” y a los de más alta energía se los llama “orbitales de banda de conducción, OBC”. La asignación de energía para los electrones de valencia, en las bandas, se establece según los mismos principios que permiten conocer la estructura electrónica de los átomos aislados. Según el metal de que se trate, los OBV pueden estar semilenos o llenos y los OBC pueden encontrarse vacíos o semivacíos. Para los metales del bloque “d”, especialmente los de mayor carga nuclear, por cada mol de átomos se prevé la combinación lineal de 9 mol de OA resultando la formación de 9 mol de OB con 4,5 mol de OBV y 4,5 mol de OBC. Por ejemplo, para los elementos Cobre y Zinc se tienen las siguientes estructuras:

Átomos aislados:



Cristales metálicos:



Esta descripción de la estructura electrónica permite explicar varias propiedades de los metales, por ejemplo, por qué razón son buenos conductores de la energía eléctrica. Es que, por absorción de ésta, un electrón de un OBV puede excitarse hasta un nivel de energía más alto, vacío o semivacío, de un OBC. Esta excitación electrónica está facilitada dado que el electrón de valencia siempre encontrará disponible un nivel de energía muy cercano para excitarse.

Teniendo en cuenta que la Teoría de Bandas es una extensión de la TOM, es lícito reemplazar las denominaciones OBV y OBC por: “orbitales de banda enlazantes” (OB^b) para el subgrupo de menor energía y “orbitales de banda antienlazantes” (OB^*) para el subgrupo de mayor energía, respectivamente. De esta forma, a manera de ejemplo, la descripción de las estructuras de los cristales de los metales Cobre y Zinc es como sigue: $\text{Cu(s)}: (\text{OB}^b)^9 (\text{OB}^*)^2$ $\text{Zn(s)}: (\text{OB}^b)^9 (\text{OB}^*)^3$

La hipótesis que se plantea en este trabajo es que el desconcepto aparece como consecuencia del propio nombre “banda de conducción” y del significado que los estudiantes le otorgan al mismo.

Por ello aquí se propone utilizar tanto la terminología OBV - OBC como así también la que proviene de la TOM, OB^b - OB^* y luego evaluar la frecuencia de aparición del desconcepto en función de la terminología que el estudiante utiliza.

Metodología

Este trabajo fue desarrollado en el segundo semestre del año 2008, con la totalidad de los estudiantes ($n = 216$) del curso de Química General. Los estudiantes pertenecían al tercer semestre de las carreras de ingeniería eléctrica, electrónica y mecánica y al cuarto semestre de la carrera de ingeniería industrial, con una duración de 16 semanas a razón de 6 horas cada una y actividades extracurriculares de laboratorio, integración y consultas.

En relación al tema que nos ocupa, en estos cursos se presentaron, en forma teórica y práctica los siguientes temas: revisión de la estructura del átomo y de las propiedades periódicas, enlaces iónico, covalente y metálico, con una duración total en el aula de 18 horas.

A los efectos de detectar la presencia del error conceptual mencionado y de realizar el control pertinente a sus posibles modificaciones, se realizaron las siguientes acciones:

A.- Durante el desarrollo de los procesos de enseñanza y de aprendizaje se llevó un registro de la frecuencia de aparición de tal desconcepto en los estudiantes en las actividades formales (tipo coloquios) o consultas grupales y entrevistas.

B.- En la presentación del tema Enlace Metálico, se aplicaron ambas terminologías con el objetivo de comprobar si, en realidad, con la terminología propuesta se detectaba una disminución de la frecuencia de aparición del desconcepto.

C.- En la primera evaluación escrita de acreditación de la asignatura se les presentaron a los estudiantes las siguientes cuestiones a resolver acerca de las propiedades de los metales:

Ítem 1.- Aplicando la teoría de bandas de los sólidos, compare la fuerza del enlace metálico presente en los metales Cobre y Cinc.

Ítem 2.- Teniendo en cuenta los elementos teóricos utilizados en la respuesta anterior, ¿podría usted predecir si uno de estos metales es mejor conductor de la electricidad que el otro? Argumente científicamente al respecto.

Siendo conscientes de la posible existencia del desconcepto, y para no perjudicar a los estudiantes en sus evaluaciones, al ítem 2 le fue asignado un puntaje insignificante (solamente una décima del total) tomando además la unánime decisión de que ningún estudiante dejaría de aprobar la evaluación por una respuesta incorrecta a esa cuestión.

La frecuencia de aparición del desconcepto fue medida en la primera evaluación de acreditación de la asignatura a la que los estudiantes arribaron con el conocimiento de la Teoría de Bandas aplicada a los metales pudiendo utilizar libremente cualquiera de las dos terminologías y se la valoró a través del número de respuestas incorrectas.

Resultados

Las explicaciones de los estudiantes registradas en las actividades de coloquios, consultas y entrevistas fueran divididas en dos categorías: no pertinentes y pertinentes. Al comenzar el tratamiento del tema sus presencias significaron, respectivamente, el 85% y 15% del total. Entre las pertinentes, como se esperaba, las explicaciones incorrectas más frecuentemente registradas fueron las que atribuyen mayor conductancia eléctrica al metal que posee mayor cantidad electrones de valencia en la banda de conducción. Estos resultados confirmaron la existencia del desconcepto.

En el siguiente cuadro se presentan los resultados para el ítem 2, de acuerdo a la terminología utilizada en la primera evaluación parcial de acreditación.

	Terminología usada al responder al ítem 2		Total
	OB ^b – OB*	OBV - OBC	
Correctas	72 (33,3%)	49 (22,7%)	121 (56,0 %)
Incorrectas	30 (13,9%)	65 (30,1%)	95 (44,0%)
Total	102 (47,2%)	114 (52,8%)	216 (100%)

La lectura del cuadro nos muestra que una gran cantidad de estudiantes, 95 (44,0%) respondió equivocadamente, prediciendo que el metal Cinc es mejor conductor que el metal Cobre (Valores experimentales: conductividad del Zn: $17 \times 10^6 (\Omega \text{ m})^{-1}$, conductividad del Cu: $59 \times 10^6 (\Omega \text{ m})^{-1}$ (Askeland D.R., Phulé P.P., 2004; Smith W.F., 2004).

Sin embargo, un análisis estadístico de los resultados, indica marcadas diferencias en las respuestas obtenidas según la terminología usada por los estudiantes en sus aplicaciones en la Teoría de Bandas. La Prueba Ji-cuadrado de asociación tuvo un Estadístico de 16,6514 ($p = 0,0000$), lo cual indica que existen evidencias de asociación estadística altamente significativa entre la terminología empleada y las respuestas. El resultado de la Prueba χ^2 fue $p < 10^{-4}$, de lo que se concluye que la proporción de respuestas correctas en el grupo que usó la terminología OB^b – OB* es significativamente superior que la proporción de correctas en el grupo que usó la terminología OBV - OBC.

El cociente de chances, OR, (“odds ratio”) OB^b – OB* / OBV - OBC tiene un valor igual a 3,183673 el cual indica que el grupo de estudiantes que trabajó con la terminología OB^b – OB* tiene una chance 3,183673 veces superior de responder correctamente que el grupo de estudiantes que utilizó la terminología OBV - OBC. Como para este coeficiente se trabajó con un intervalo de

confianza del 95%, puede afirmarse con esa confianza, que el grupo de estudiantes que aplicó la terminología $OB^b - OB^*$ tiene una chance entre 1,81 y 5,60 veces superior de contestar correctamente que en el otro grupo.

Discusión y conclusiones

¿Cuál es el posible origen del desconcepto? ¿De dónde sale esta confusión en los estudiantes?

Si bien en los cursos de Química no se pretende, ni es pertinente, que los estudiantes puedan predecir cuál metal es mejor conductor que otro, los resultados antes expuestos distan mucho de ser los deseables y están marcando la posibilidad de que los estudiantes aprueben la asignatura manteniendo en sus mentes un concepto errado al respecto y que luego aplicarían en asignaturas de semestres siguientes.

Asignar mayor conductividad al metal que posee mayor cantidad de electrones de valencia en la banda de conducción, OBC, puede resultar como consecuencia de la propia denominación de esos orbitales que los docentes, libros de texto y artículos de páginas Web, asignan a estos orbitales.

Los resultados expuestos y la hipótesis aquí mencionada nos sugieren realizar algunos cambios y, entre ellos, referirnos a los dos subgrupos de OB, con otras denominaciones. Para ello, teniendo en cuenta que la Teoría de Bandas es una extensión de la Teoría de Orbitales Moleculares, es razonable utilizar para los dos subgrupos de cada banda las denominaciones que se derivan de las propias de esta teoría, a saber, para los de menor energía “orbitales de banda enlazantes”, OB^b , y para el subgrupo de mayor energía “orbitales de banda antienlazantes”, OB^* . Además, esta reasignación de denominaciones aplicada a los cristales metálicos no solamente aportaría a solucionar el desconcepto aquí estudiado sino que facilitaría la comprensión de que cada electrón de valencia con la energía de los OB^b incrementa la fuerza del enlace metálico y que, contrariamente, cada electrón con la energía de los OB^* la disminuiría.

Si bien esta investigación solamente está referida a los metales, teniendo en cuenta que la Teoría de Orbitales Moleculares puede extenderse a todos los cristales con enlaces deslocalizados, proponemos, al menos para los cursos básicos de Química de las carreras de ingenierías, reemplazar la terminología OBV - OBC por $OB^b - OB^*$ no solamente para los metales sino también para aisladores y semiconductores con las características estructurales indicadas anteriormente.

Referencias

- AMERICAN CHEMICAL SOCIETY (2005). *Química. Un proyecto de la ACS*. Buenos Aires: Editorial Reverté S.A.
- ATKINS, P. y JONES L. (2006). *Principios de Química*. Tercera edición. Buenos Aires: Editorial Médica Panamericana.
- BROWN, T. L., LE MAY, H. E. JR, BURSTEN, B. E y BURDGE, J. R. (2004). *Química. La ciencia central*. Novena edición. Buenos Aires: Pearson Prentice Hall.
- CHANG, R. (2007). *Química*. Novena edición. Buenos Aires: Mc Graw Hill.
- PLIEGO, O. H. (2008). *Química General para Ingenierías y Ciencias Exactas*. Rosario, Argentina: Magenta Impresos..
- SMITH, W. F. (2006). *Fundamentos de Ciencias e Ingeniería de Materiales*. 4ª edición. Madrid: McGraw Hill Inc.
- WHITTEN, K. W., GAILEY, K. D. y DAVIS, R. E. (1992). *Química General*. Tercera edición. Buenos Aires: McGraw-Hill.
- SABIH, M. F. (2008). *Materiales para Ingenierías*. Madrid: Reverté.
- ASKELAND, D. R. Y PHULÉ, P. P. (2004). *Ciencia e Ingeniería de los materiales*. 4ta. edición. México: Thomson Internacional Editores.
- KREMER, C. (2000). *Las redes metálicas y sus bandas escondidas. Anuario Latinoamericano de Educación Química*, XII, pp. 255 – 259.
- KREMER, C. (2001). *Diagrama de bandas en las formas alotrópicas del carbono. Anuario Latinoamericano de Educación Química*, XIV, pp. 137 – 141.

- KREMER, C. (2002). *Diagrama de bandas en compuestos iónicos binarios*. *Anuario Latinoamericano de Educación Química*, XV, pp. 211 – 214.
- www.esmijovi.com/imagenes/cuantica_2.png
- www.ing.unlp.edu.ar/quimica/Q1.htm
- www.monografias.com/trabajos7/diose/Image2907.gif
- www.politecnicovirtual.edu.co/Pagina%20Coordinacion%20CB/Fisica/3_6.html.