

El electrón diferencial (o diferenciador). ¿Para qué sirve?

Gabino A. Carriedo

Resumen: Este artículo defiende que la deducción de un átomo a partir de los cuatro números cuánticos de un llamado electrón diferenciador, es un problema artificial, innecesario y basado en reglas arbitrarias, resultando muy capaz de originar errores graves sobre el concepto y uso de la configuración electrónica. Por ello no debiera formar parte de un plan docente para química de Bachillerato ni incluirse entre los objetivos de la enseñanza de la química recogidos en los Boletines Oficiales del Estado.

Palabras clave: electrón diferenciador, configuración electrónica, números cuánticos, valencia, enseñanza de la química.

Abstract: The assignment of four quantum numbers to the so called differentiating electron, considered as the last to be “located” in the electronic configuration of an atom, may help to confuse electrons with the spin-orbitals used to obtain a good approximation to the polyatomic atom wave function. But, using those four quantum numbers to deduce which is the atom concerned is an artificial unnecessary problem based in arbitrary rules which, furthermore, leads to failures when the electronic configurations are exceptions to the *aufbau*, a case very frequent among the transition elements, the lanthanides and the actinides. Instead of helping to understand the atomic electronic structure, this problem is very capable of arising severe conceptual errors. Therefore, its inclusion in learning programs of secondary school chemistry should not be encouraged.

Keywords: differentiating electron, electron configuration, quantum numbers, valency, teaching chemistry.

INTRODUCCIÓN

Desde hace algún tiempo se viene observando la aparición en la enseñanza de la química en el bachillerato de problemas que piden la deducción de un átomo partiendo de los cuatro números cuánticos que, se supone, pertenecen a su “electrón diferenciador”, definido como el que “se añade al pasar de un elemento a otro”, o el “último electrón de un átomo”. Esos problemas pueden, a primera vista, parecer interesantes, pero, cuando se examinan los criterios propuestos para resolverlos, se encuentra que son arbitrarios y que solo conducen a respuestas “correctas” cuando se cumplen estrictamente las reglas del *aufbau* para la determinación de las configuraciones electrónicas de los átomos. Como es bien sabido, estas reglas tienen numerosas excepciones entre los elementos de transición, los lantánidos y los actínidos (la mayor parte de la Tabla Periódica). Pero, los problemas del electrón diferenciador encierran un peligro mayor: la propagación de errores conceptuales sobre la configuración electrónica de los átomos,

ya que equiparan a los electrones (partículas reales que en los átomos son indiscernibles), con los espín-orbitales (funciones matemáticas) que se utilizan para obtener una buena aproximación a la función de onda de los átomos polieletrónicos. Es cierto que el llamado *lenguaje coloquial* o distendido, es muy utilizado entre los profesores y alumnos para tratar temas mecanocuánticos realmente complejos. Por ejemplo: es frecuente hablar de “colocar” electrones en los orbitales; de orbitales “vacíos” o “llenos”; de que el orbital 4s está “por encima” o “por debajo” del 3d; que, al ionizarse un átomo, el electrón “sale” de tal orbital; o de que el electrón de valencia de litio es el 2s. Ese lenguaje es aceptable, por su evidente agilidad, solo si quien lo utiliza sabe realmente lo que está diciendo. Pero, puede estar sucediendo que, debido a su mala utilización, esté empezando, no ya a sustituir al lenguaje riguroso (mucho más árido), sino a ser considerado como si fuera conceptualmente realista. El problema del electrón diferenciador puede contribuir a empeorar esta situación.



G. A. Carriedo

Universidad de Oviedo
C/Julián Clavería 8. Oviedo 33006
C-e: gac@uniovi.es

Recibido: 29/03/2019. Aceptado: 20/05/2019.

EL ELECTRÓN DIFERENCIADOR Y SU CUESTIONABLE USO

La configuración electrónica de los átomos polieletrónicos es uno de los conceptos más importantes de la Química. Pero es esencial saber que consiste en una serie de orbitales atómicos elegidos para representar a los electrones del átomo de manera que, si se trata de describir el estado fundamental de ese átomo, conduzcan al mínimo posible de energía electrónica total.^[1] Esa elección se realiza

siguiendo las bien conocidas reglas del *aufbau* (a su vez, otra aproximación ya que tiene numerosas excepciones). Así, la configuración del Be, por ejemplo, es $(1s)^2(2s)^2$. Ésta indica que, para obtener una buena aproximación a la función de onda del átomo de Be (4 electrones) en su estado fundamental hacen falta cuatro espin-orbitales (funciones monoeléctricas) y se han elegido el orbital 1s del berilio dos veces (el $[1s, \frac{1}{2}]$ y el $[1s, -\frac{1}{2}]$) y el orbital 2s del berilio dos veces (el $[2s, \frac{1}{2}]$ y el $[2s, -\frac{1}{2}]$).^[2] No hace falta insistir en que elegir un mismo orbital más de dos veces supone repetir un espin orbital lo que conduce a un determinante de Slater nulo por lo que tal elección no puede describir ningún estado posible del átomo (es decir, la regla de Pauli).

La representación gráfica de la configuración electrónica con cajas “ocupadas” con uno o dos electrones de espines opuestos, es muy gráfica y fácil de entender para principiantes, de ahí su frecuente uso, pero, si no se utiliza correctamente, puede conducir a errores conceptuales muy difíciles de erradicar cuando se pasa a niveles más avanzados. Uno de esos errores es la insistencia en lo que se ha venido en llamar “el electrón diferenciador” que ha llegado hasta Boletines Oficiales para ser exigido a nivel de Bachillerato.^[3] Suele definirse como el “electrón que se añade al pasar de un elemento a otro”, o el “último electrón de un átomo”, o incluso “el más alejado” del núcleo, etc. Veamos, entonces, como funciona. Tomemos ahora el átomo de boro. Su configuración electrónica para el estado fundamental es $(1s)^2(2s)^2(2p)^1$. Por ello el electrón diferenciador sería el representado por uno de los orbitales 2p del boro. Dejando al margen que los 5 electrones del átomo de boro son indiscernibles (luego no hay un electrón último ni un electrón primero), y que es del todo indiferente que el espín orbital que aparece en último lugar en la configuración sea un $[2p, \frac{1}{2}]$ o un $[2p, -\frac{1}{2}]$, la pregunta relevante es ¿para qué sirve ese concepto? Más adelante veremos que, realmente, para nada. Pero, la cuestión puede complicarse más cuando, en una vuelta de tuerca, se identifica al “electrón diferenciador” con sus cuatro números cuánticos, para lo cual se hace necesario acordar todo un convencionalismo tan curioso como arbitrario.^[4]

Los orbitales se representan por cajas con sus números cuánticos y los orbitales np *deben* ordenarse, precisamente, en el orden $[n, -1]$, $[n, 0]$, $[n, +1]$ (en realidad, también podría haberse *acordado* el orden inverso del número cuántico l). Después, para los números cuánticos de espín, deben elegirse como primero el $+1/2$ (flecha hacia arriba). De este modo resulta que el electrón diferenciador del B es el $[2, 1, -1, +\frac{1}{2}]$ (nótese que, en realidad, eso correspondería a un espin-orbital y no a un electrón, por lo que se está confundiendo lo uno con lo otro).

Ahora dejemos de lado la evidente arbitrariedad de ese convenio y pasemos a la siguiente vuelta de tuerca que es plantear algo más difícil, el problema inverso, es decir: a partir de un electrón diferenciador identificar al átomo. Por ejemplo, el $[2, 1, -1, +\frac{1}{2}]$ nos llevaría al B. Nótese que el $[2, 1, -1, -\frac{1}{2}]$ nos llevaría al oxígeno, demostrando los

efectos de poner primero el espín $1/2$ o $-1/2$. De nuevo dejemos de lado los errores conceptuales derivados de identificar un electrón concreto entre los N electrones de un átomo mediante los 4 números cuánticos de uno de los N espín-orbitales correspondientes a su configuración electrónica, y concentremos nuestra atención en la utilidad real del problema. A ningún químico se le ha presentado, ni se presentará nunca en su vida profesional, el problema de identificar un átomo partiendo de 4 números cuánticos atribuidos a su “último electrón”. Es decir, *se trata de un problema artificial*, solo necesario para superar un examen donde se incluya tal pregunta. Pero, además, la solución de algunos “problemas de electrón diferenciador” puede resultar ambigua. Por ejemplo, ¿a qué átomo corresponde el electrón diferenciador $[3, 2, 2, \frac{1}{2}]$? Dado que el número cuántico principal es 3, el segundo número, un 2, apunta a un orbital d, en cuyo caso, sería un 3d. El tercer número es un 2, lo que, según las reglas acordadas, se trata del orbital d colocado en el “último” lugar (el quinto). Por lo tanto, el electrón es el “último” de un d^5 , es decir: $d_{(-2)}^1 d_{(-1)}^1 d_{(0)}^1 d_{(+1)}^1 d_{(+2)}^1$. El átomo en cuestión sería el d^5 del período 4, o sea el Mn ($4s^2 3d^5$).

Pero supongamos que *sabemos* que el cromo (grupo 6 de la Tabla Periódica) es una de las “excepciones” a las reglas del *aufbau* y que su configuración electrónica *en el estado fundamental* es $(4s)^1(3d)^5$ en lugar de $(4s)^2(3d)^4$. Entonces su “electrón diferenciador” es $[3, 2, 2, +\frac{1}{2}]$ (y no $[3, 2, 1, +\frac{1}{2}]$). Por tanto ¿a qué átomo pertenece el electrón diferenciador $[3, 2, 2, +\frac{1}{2}]$, al Mn o al Cr? *Es decir, para identificar a un átomo con el electrón diferenciador hay que saber de antemano si su configuración electrónica cumple las reglas del *aufbau* o si es una de las excepciones y, para eso, no hace falta utilizar al electrón diferenciador.* El problema no es irrelevante porque las excepciones a la regla del *aufbau* son muchas entre los elementos de transición y muchísimas entre los lantánidos y los actínidos. Tómese por ejemplo, el “electrón” $(3, 2, +1, -\frac{1}{2})$, debe ser un átomo con configuración en su capa de valencia $3d^9$. ¿Qué átomo es ese? La respuesta tentadora es el cobre, pero éste no puede ser ya que, como otra excepción al *aufbau*, su configuración para el estado fundamental es $(4s)^1(3d)^{10}$, y no $(4s)^2(3d)^9$. También podría haber sido un átomo $4s^1 3d^9$, que correspondería a un Ni muy lejos de su estado fundamental ($4s^2 3d^8$). Esas incertidumbres vienen del problema de la “ocupación” de un 3d antes que un 4s.^[5]

Quizá podría afinarse el “método identificativo del átomo” aumentando las reglas del “convenio” del electrón diferenciador, o dando alguna pista adicional. Pero, la pregunta sigue en pie ¿para qué sirve realmente un convenio tan artificioso y falto de rigor conceptual? Entonces, ¿de donde viene ese concepto y por qué se le considera lo suficientemente importante como para aparecer en los Boletines Oficiales que deben guiar la enseñanza de la química?

Revisando la bibliografía sobre el electrón diferenciador, que en su mayor parte está recogida en foros en internet donde abundan preguntas y repuestas no siempre bien fundamentadas, parece que todo pudo tener su origen en

una frase de Niels Borh introduciendo la idea de *differentiating electron* que, en la mayoría de los casos ocupa “an outer shell and not an inner one”.^[6] El concepto ha aparecido, como tal, en algún libro de texto de Química Inorgánica^[7] y ha sido utilizado para discutir sobre la más adecuada ubicación de átomos en los grupos de la Tabla Periódica.^[8,9] Por ejemplo, el He (1s)² con un orbital de valencia 1s está, sin embargo, en el bloque p con los demás gases nobles (ns)²(np)⁶. Lo que no parece es que esa idea deba servir también para “deducir” átomos a partir de supuestos “últimos” números cuánticos.

CONCLUSIONES

Por todo lo expuesto, sería muy deseable que, a pesar de lo “entretenido” que pueda resultar deducir átomos a partir de los cuatro números cuánticos de un supuesto “último” electrón, se tuviera en cuenta la arbitrariedad de sus reglas, su falta de rigor conceptual y su práctica inutilidad. El concepto de electrón diferenciador no contribuye a comprender mejor las configuraciones electrónicas de los átomos y el cociente entre su aportación y el tiempo invertido en deducciones artificiosas y conceptualmente vacías es muy pobre. Es mucho más preferible concentrarse en comprender bien el concepto de configuración electrónica, en las reglas del aufbau y en las consideraciones sobre las energía orbitales y los efectos de repulsión interelectrónica que explican las “excepciones”, como las del cromo o el cobre. Para todo ello, se recomienda la lectura de un artículo ya clásico titulado “Por qué el 4s se ocupa antes que el 3d”.^[5] Y, ya de paso, invertir más tiempo en algo tan importante como explicar el formato de la Tabla Periódica y las valencias de los átomos partiendo de su configuración electrónica.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a los profesores de la Universidad de Oviedo José A. Sordo, Angel M. Pendás, Aurora Costales, Manuel Recio y Jose M. Fernández Colinas, la lectura crítica de este manuscrito y la incorporación de sugerencias útiles para su elaboración.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Téngase en cuenta que esto ya es una aproximación utilizada ante la imposibilidad de obtener la función de onda del átomo como solución exacta de la ecuación Schrödinger correspondiente.
- [2] En lugar de los números cuánticos de spín suelen emplearse las notación α y β para diferenciar entre los dos espín orbitales 1s, 2s, etc.
- [3] Véase, por ejemplo, el BOE de 15 de enero de 2019, página 2707 y el Boletín Oficial del Principado de Asturias, n.º 149, de 29-VI-2015, páginas 365-577.
- [4] Véase, por ejemplo, el recogido en el libro: J. C. Cedron y J. Robles. *Química General. Materia de Enseñanza*, Lima. Universidad Católica de Perú.
- [5] M. P. Melrose. *J. Chem. Educ.* **1996**, *73*, 498.
- [6] E. R. Scem. *A tale of seven scientist and a new philosophy of science*. Oxford University Press. 2016, pág. 123. E. R. Scem. “Selected Papers on the Periodic Table” Word Scientific Publishing, Co, Pte. Ltd. Singapore. 2009, pág 48 (*American Scientist*, vol. 85).
- [7] J. J. Lagowski. *Química Inorgánica Moderna*. Reverté S. A., 1975, pág. 33.
- [8] W. B. Jensen. *J. Chem. Educ.* **1982**, *59*, 634.
- [9] E. Scerri. Education in Chemistry. <https://eic.rsc.org/opinion/five-ideas-in-chemical-education-that-must-die-part-five/2010032.article>

