

La incomprendida electronegatividad (trilogía)

III. Comprendiendo a la electronegatividad

Guillermo Salas-Banuet, José Ramírez-Vieyra y Ma. Eugenia Noguez-Amaya*

ABSTRACT (Understanding the electronegativity —Trilogy. III. The misunderstood electronegativity)

There are dozens of electronegativity (X) scales published. Excluding the ones proposing simple correlations between properties, they are summarized here. The different intents to evaluate and regulate the X scales are displayed. A balance was made, allowing us to appreciate: the great diversity of ideas generated over the years; the scales tendency is not so different when comparing with Pauling's one; and no one is 100% successfully in a given application. This permits the authors to suggest that X is not a property, but a behavior. To find a universal X scale at this moment seems difficult.

KEYWORDS: electronegativity, scales, properties, applications, structure

Introducción

Esta obra es la tercera de una trilogía sobre la electronegatividad atómica (X): *La incomprendida electronegatividad*. La primera (Salas, Ramírez y Noguez, 2011a) plantea la situación contradictoria y al mismo tiempo similar de la X , que permite fundamentar algunas preguntas esenciales sobre su validez y existencia, así como de la trilogía. Se define el foco de esta última en la interpretación del trabajo realizado durante siglos y la propuesta de un significado particular, para intentar comprenderla mejor. Así, ofrece el panorama de la transformación del pensamiento integral, durante la concepción del concepto llamado electronegatividad y sus resultados concretos, que son algunas escalas cualitativas de X , que ayudaban a explicar los resultados de los experimentos químicos y a predecirlos; su síntesis se expresa en la primera proposición de una escala cuantitativa, realizada por Linus Pauling. Como corolario, se racionaliza sobre la imposibilidad de aterrizar las ideas generadas sobre la X , antes de Pauling, en una escala cuantitativa y las circunstancias que rodearon al trabajo del mismo. La segunda obra (Salas, Ramírez y Noguez, 2011b) presenta los detalles de las propuestas más originales y divulgadas, sobre los primeros métodos planteados después de Pauling, que buscaban proponer una definición universal de la X a través de un modelo, para obtener una escala cuantitativa, también universal. Nos servimos de los argumentos estructurados por algunos de esos mismos pensadores —que los utili-

zaron para discutir, criticar, valorar, descalificar o aplaudir las diversas propuestas de sus colegas— con el objeto de explicar y comparar los resultados. También se incluye una sección dedicada a la electronegatividad de los elementos en diferentes estados de oxidación, que es parte de la X , pero que difiere de los modelos para los elementos en su estado basal.

Como la información se presenta históricamente, es posible apreciar que las propuestas están encadenadas, sirviendo la anterior de base a la posterior. Está incluida una sección de las propuestas para evaluar y reglamentar a la X . Es posible distinguir un desprecio intelectual hacia la escala empírica de Pauling, aunque muchos autores la usen para comparar la suya, lo que entendemos como un intento de validación de su propia escala. Es notoria la valoración hacia las propuestas que se sustentan en conceptualizaciones teóricas, aunque no se ajusten bien la química experimental, posiblemente con la intención de perfeccionarlas. Se distingue la inexistencia de un acuerdo sobre el significado físico de la X , lo que lleva a que cada definición de X publicada se base en diferentes propiedades o estructuras y que tengan, por supuesto, diferentes unidades (de fuerza, energía, energía/electrón, etc.) o en ninguna, siendo adimensional. En ésta, la tercera parte de la trilogía, se exhibe la compilación de los trabajos publicados en los siglos pasado y actual, que dan una imagen global de las múltiples características sobre la X . Con ello fue posible apreciar el todo, distinguir los desacuerdos y las ideas sobresalientes que nos permitieron tener acceso a una interpretación diferente, con lo que pudimos encontrar un significado particular.

Las otras escalas de electronegatividad (X)

Desde la primera propuesta de Pauling hasta la fecha de elaboración de este trabajo (periodo de casi 80 años) hemos encontrado, entre las revistas occidentales más consultadas, múltiples trabajos enfocados a proponer una escala de X ; los que sólo usaron relaciones de propiedades o eran poco originales

* Departamento de Ingeniería Metalúrgica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México. Av. Universidad 3000, México, D.F.

Tel.: +52 (55) 5622 5243.

Correos electrónicos: salasb@unam.mx; jgrv@unam.mx; nogueza@unam.mx

Fecha de recepción: 8 de febrero de 2010.

Fecha de aceptación: 3 de julio de 2010.

se dejaron fuera, quedando cerca de 40 (tabla 1). En ésta es posible valorar: la concepción de visiones, el planteamiento de fundamentos, las diferentes definiciones pensadas y con cuál(es) escala(s) decidieron compararse. Las diversas escalas se fundamentan en características atómicas —principalmente— y moleculares, tanto de la estructura (radios atómicos, longitudes de enlace, etc.) como de las propiedades (potenciales de ionización, carga eléctrica, etc.). Analizando las comparaciones, es posible distinguir que cerca del 80% de los autores comparan su escala con alguna otra; más del 70% lo hace directa (62%) o indirectamente (8%) con la de Pauling; el 20% que agrupa a las que tienen un origen en la mecánica cuántica, no hace comparaciones, o las hace con alguna con su mismo fundamento. Al ajustar los valores de una escala al rango de los de la de Pauling, durante las comparaciones, surge el concepto de las Unidades Pauling (UP). Aunque el empirismo y el fundamento de la escala de Pauling se señalan como erróneos, la mayoría de los autores validan su propuesta al compararla con ella (sigue siendo la más famosa y utilizada, sobre todo en la educación) y mantienen el concepto de “atraer electrones”, al definirla. Todos los trabajos parten del planteamiento de una hipótesis, aunque sólo Pauling y Malone las comprueban con experimentación propia; algunos autores toman experimentación previa ajena y calculan la X con su método; el resto deriva su comprobación matemáticamente. Las propuestas tienen dos características comunes: son conceptos sencillos y se usan fácilmente, esenciales en la ciencia y la educación.

Mullay (1987) realiza un análisis para evaluar el desarrollo de las escalas de X y plantea tres etapas: la primera involucró la búsqueda del método apropiado para calcular o medir las X atómicas; en la segunda, cuando se cambió el énfasis hacia el cálculo de la X de grupo y la carga atómica, se exploraron y clarificaron los efectos de la carga atómica sobre la X , y la tercera propició la profundización del concepto básico, principalmente a través del uso de la teoría de la densidad funcional (Parr, 1978). Sin embargo, de ahí en adelante se han publicado, indistintamente, trabajos del tipo de las tres etapas planteadas. En otro orden de ideas, en la tabla 1 se ve que el número de trabajos publicados, por decenio, fue: tres durante los años 30 del siglo pasado, dos en los 40, tres en los 50, seis en los 60, seis en los 70, 10 en los 80, uno en los 90 y seis en los primeros ocho años de este siglo; aun sumando a éstos los trabajos que se dejaron fuera (menores en cantidad), el incremento no es comparable con el número de químicos realizando investigación y publicando en el mismo periodo de tiempo.

Evaluando y reglamentando a la electronegatividad

Gordon Sproul (1994) pensó que una manera de evaluar 15 de las escalas de X era usando los triángulos del enlace. Graficó el promedio de la X versus la diferencia de electronegatividades, para 311 compuestos binarios bien identificados por su tipo de enlace, obtenidos del libro de texto de A. F. Wells,

quien utilizó sólo parámetros físicos y químicos medibles y evitó usar la X . Concluye que todas las escalas dan gráficas triangulares que segregan efectivamente a los compuestos considerados en tres regiones, por el tipo de enlace característico: metálico, covalente o iónico y que las escalas que proveen la mejor segregación de los compuestos son la de Allen (1989) y la de Nagle (1990), con un acierto superior al 96%. Esto provocó que Peter G. Nelson publicara un comentario (1995) en el que señala, entre otros detalles, que el tipo de enlace no es una propiedad medible y que en las ediciones previas del texto de Wells, se da la impresión de haber utilizado la X para realizar algunas de sus asignaciones. Sproul contestó (1995), entre otras cosas, que Wells no menciona, en el texto de referencia, la posibilidad de usar a la X para determinar tipos de enlace, sino que, para hacerlo, utilizó algunos fenómenos subjetivos como conductividad/resistencia eléctrica, puntos de fusión y características estructurales, tales como iones aislados, anillos, cadenas, moléculas separadas, etc.

Murphy *et al.* (2000) —entre ellos Leland Allen— establecieron nueve reglas que, a su criterio, todas las escalas de X deberían de obedecer:

1. Las electronegatividades atómicas necesitan ser obtenidas de las propiedades de los átomos libres;
2. Es necesaria una precisión de tres cifras (unidad, décima y centésima);
3. La X es una energía por electrón;
4. Todos los electrones de valencia deben ser incluidos en la definición de X ;
5. Tres requerimientos del grupo principal están interrelacionados: a) la identificación de la X con el poder atrayente de un átomo por electrones es generalmente igual a su poder para retenerlos; b) los átomos de los gases nobles sólo tienen la habilidad para retenerlos, y c) las magnitudes de la X deben, paralelamente, establecer limitaciones de oxidación;
6. Los valores de X de los ocho elementos semimetálicos (B, Si, Ge, As, Sb, Te, Bi y Po) no deben de traslaparse con los de los metales y no metales; se debe respetar la regla del Si: todos los metales deben tener valores de X menores o iguales al del Si;
7. Para los compuestos binarios, AB , las electronegatividades de A y de B deben de calificar y definir los tipos de enlace como iónico, covalente o metálico;
8. La X debe tener una definición mecánica cuántica viable, y
9. La escala de X debe mostrar un incremento sistemático de izquierda a derecha a través de los periodos.

Esta última regla no es cumplida por la escala de Allen, específicamente para los metales de transición. Los autores aplicaron estas reglas a la escala de X_p y dictaminaron que sólo satisface las reglas 4 y 5 del criterio. Además, indican algunos errores de Pauling que, según ellos, han influido fuertemente en la actitud negativa de los químicos hacia la X :

Tabla 1. Compendio de los trabajos que tienen alguna originalidad, que presentan escalas de X .

Autores/Año	Definición	Compara con:
Malone / 1933	$\mu_b = k \mathbf{X}_A - \mathbf{X}_B $; μ_b : momento dipolar de una molécula en estado gaseoso; k , constante dieléctrica; \mathbf{X}_A y \mathbf{X}_B , electronegatividades de los átomos A y B .	Pauling
Gordy / 1946	Atracción de un átomo por los electrones que enlaza en una molécula estable: $k = aN \left(\frac{\mathbf{X}_A \mathbf{X}_B}{d^2} \right) + b$; k , constante de fuerza del enlace molecular; N , el orden del enlace; \mathbf{X}_A y \mathbf{X}_B las electronegatividades de los átomos A y B ; d , la distancia del enlace; a y b , constantes.	Pauling
Hinze y Jaffé / 1962	Propiedad de los orbitales (de enlace o semioocupados); depende de su carácter y se calcula mediante potenciales de ionización y afinidades electrónicas para el estado de valencia del átomo.	Pauling
Hinze, Whitehead y Jaffé / 1963	Poder de un átomo, en su estado de valencia, para atraer un electrón adicional en la formación del enlace. La electronegatividad orbital es una propiedad de un orbital individual en el átomo: $\mathbf{X}_j = \left(\frac{dE}{dn_j} \right)$; E , energía del átomo; n_j , el número de electrones en el orbital.	
Klopman / 1964	$\mathbf{X}_X = B_X^r + \sum_{s=r} C_{X_s}^2 A_X^+ \delta_{rs} + \sum_{s=r} C_{X_s}^2 A_X^- (1 - \delta_{rs})$; B , A^+ y A^- son constantes, r y s representan al electrón y al par electrónico correspondiente (spin).	
Jørgensen / 1970	$\hbar\omega = 30,000[\mathbf{X}_{op}(\mathbf{X}) - \mathbf{X}_{op}(M)]$; $\hbar\omega$: energía fotónica de la primera banda de transferencia Laporte-permitida en un sistema metal de transición-ligando; $\mathbf{X}_{op}(M)$ y $\mathbf{X}_{op}(X)$, la electronegatividad óptica del metal y del ligando.	
St. John y Bloch / 1974	Suma de los componentes orbitales, relacionados directamente con los defectos cuánticos: $\mathbf{X} \equiv a \sum_{i=0}^2 \mathbf{X}_i + b$; \mathbf{X}_i , componentes orbitales; a y b , constantes.	Pauling; $\mathbf{X}_p = 0.43 \sum_{i=0}^2 \mathbf{X}_i + 0.24$; Phillips
Simons, Zandler y Talaty / 1976	Grado de transferencia electrónica en un enlace, medido por un multiplicador orbital: $\mathbf{X}_A - \mathbf{X}_B = \frac{K(R_A - R_B)}{2R_A + 2R_B}$; \mathbf{X}_A y \mathbf{X}_B son las electronegatividades de los átomos A y B ; R_A y R_B , sus distancias al centro del orbital.	Pauling; Allred-Rochow; St. John
Mande, Deshmukh y Deshmukh / 1977	Para los estados de valencia: $\mathbf{X}_{MDD} = \frac{e^2(Z_{eff})}{r^2}$; $e^2(Z_{eff})$ carga nuclear efectiva; r , radio covalente.	Pauling; $\mathbf{X}_p = 0.788\mathbf{X}_{MDD} + 0.5$; Allred-Rochow
Poltzer y Weinstein / 1979	$\mathbf{X} = - \left(\frac{dE}{dn} \right)_v$; E , energía atómica como función de: a) número de electrones de los átomos enlazados, sus números atómicos y la separación entre los átomos, y b) además de lo anterior, del número de electrones deslocalizados.	
Böhm, Sen, Schmidt / 1981	$\mathbf{X}_M = \frac{I_A + A_A}{2}$; I_A , potencial de ionización más bajo; A_A , afinidad electrónica, calculados por el método del operador de transición.	Pauling
Ponec / 1981	La orbital: $\mathbf{X}_j^A = -U_{jj}^A - \left(P_A - \frac{1}{2} \right) \gamma_{AA}$; U_{jj}^A , energía de un electrón del orbital j ; g_{AA} , integral de repulsión de un electrón; P_A , la densidad electrónica total asociada al átomo A . La atómica global: $\xi_A = \frac{\sum p_{jj} \mathbf{X}_{A,j}}{\sum p_{jj}}$; p_{jj} , densidades de carga orbital individuales.	Pauling
Boyd y Markus / 1981	La carga nuclear efectiva y el radio relativo del átomo contribuyen a la tendencia general de la electronegatividad: $\mathbf{X}_a = \frac{kZ_a}{r_a} \left[1 - \int_0^{r_a} D(r) dr \right]$; k , constante, Z_a , número atómico; r_a , radio relativo.	Pauling; Sanderson; Simons, Allred-Rochow; Mande

Tabla1. Compendio de los trabajos que tienen alguna originalidad, que presentan escalas de \mathbf{X} (continúa)

Autores/Año	Definición	Compara con:
Zhang / 1982	Para elementos en estados de valencia, la fuerza electrostática ejercida por las cargas nucleares efectivas sobre los electrones de valencia: $\mathbf{X}_z = \frac{n^* (I_z / R)^{1/2}}{r^2}$; I_z es el potencial de ionización para electrones externos; R , constante de Rydberg; r , radio covalente, y n^* , el número cuántico principal.	Pauling: $X_p = 0.241X_z + 0.775$; Allred-Rochow
Parr y Pearson / 1983	Tendencia de los electrones a escaparse de la especie S . Su negativo es el potencial químico de los electrones en el átomo: $\mathbf{X}_s = \frac{1}{2}(I_s + A_s) = -\mu_s$; I_s , potencial de ionización; A_s , afinidad electrónica.	
Mullay / 1984	La de átomos o grupos, incorporando los efectos de hibridación y carga: $\mathbf{X}_A^o = \frac{1.67G_i z^2}{n_e^2} + 0.41$; G_i : constante; z : carga nuclear apantallada; n_e : número cuántico principal.	Pauling; Allred-Rochow
Robles y Bartolotti / 1984	Para un átomo: $\mathbf{X} = \left(\frac{\partial E}{\partial n} \right)_Z = -\mu$; E , energía atómica en el estado basal; n , número de electrones. Se deben tomar en cuenta los espines polarizados.	
Vera y Zuluaga / 1984	Para orbitales cerrados: $\mathbf{X} = \frac{1}{4}\varepsilon_{HOMO} + \frac{3}{4}\varepsilon_{LUMO}$ y para orbitales abiertos: $\mathbf{X} = \varepsilon_{HOMO}$; ε_{LUMO} , energía del orbital ocupado más alto; ε_{LUMO} , energía del orbital no ocupado más bajo.	
Bartolotti / 1987	La atómica o molecular, en términos de los multiplicadores de Lagrange Kohn-Sham: $\mathbf{X} = -\left(\frac{\partial E}{\partial n} \right)_v = \frac{1}{2}(\varepsilon_i + \varepsilon_j)$; v , el potencial nuclear (constante); $-\varepsilon_i = \left. \frac{\partial E}{\partial n_i} \right _0$ y $-\varepsilon_j = \left. \frac{\partial E}{\partial n_j} \right _0$	Bartolotti, Gadre y Parr; Manoli y Whitehead; Robles y Bartolotti; Sen, Schmidt y Weiss; Gazquez y Ortiz.
Luo y Benson / 1989	$V_x = \frac{n_x}{r_x}$; V_x , potencial eléctrico nuclear no apantallado (a partir de calores de formación de derivados del hidrógeno y de metilo); n_x es el número de electrones de valencia y r_x es el radio covalente.	Pauling
Nagle / 1990	$\mathbf{X} = \frac{n}{\alpha}$; n , número de electrones de valencia; α polarizabilidad de dipolo eléctrico estático.	Pauling; Mulliken; Batsanov; Huheey; Allred-Rochow, Allen; Zhang
Smith / 2002	$D_{A-B} = \frac{1}{2}(D_{A-A} + D_{A-B}) - \frac{aq_A q_B \{1 - (\rho / r_{A-B})\}}{r_{A-B}}$; q_A y q_B , cargas fraccionales de A y B ; r_{A-B} , longitud del enlace; a y ρ , constantes.	Pauling
Ghosh / 2004	$\mathbf{X} = a \frac{1}{R} + b$; R , radio atómico absoluto; a y b , constantes determinadas para cada periodo.	
Ghosh y Gupta / 2005	$\mathbf{X} = m \left(\frac{1}{\alpha} \right)^{1/3} + c$; α es la polarizabilidad de dipolo eléctrico estático; m y c , constantes para cada periodo.	Robles y Bartolotti; Nagle
Boeyens / 2008	Energía en el estado basal de un electrón libre, en el estado de valencia, confinado a la esfera de la primera ionización: $\mathbf{X}_v = \sqrt{E_g} = \frac{6.133}{r_0}$; E_g , energía de confinamiento en el estado de valencia y r_0 , el radio atómico de ionización.	Pauling; Allred; Allred y Rochow; Mulliken
Noorizadeh y Shakerzdeh / 2008	Capacidad de las especies para aceptar un número arbitrario de electrones (propensión para adquirir carga electrónica adicional y resistencia del sistema para intercambiar carga electrónica con el medio). Está relacionada a la electrofiliidad: $\omega = \frac{\mu^2}{2\eta}$; μ , potencial químico; η , dureza atómica.	Pauling; Allred-Rochow

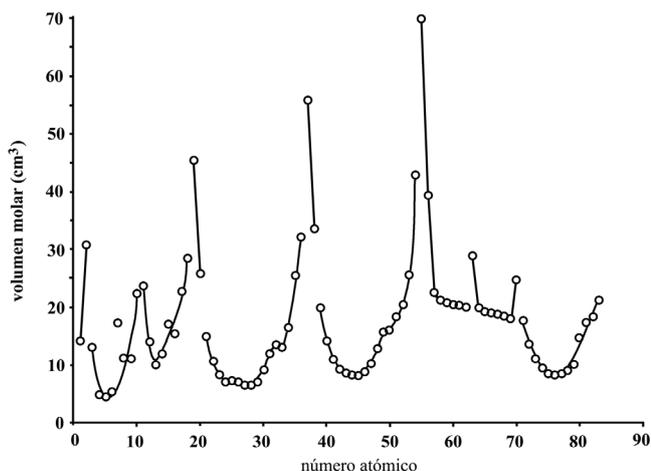


Figura 1. Gráfica moderna de la curva de Lothar Meyer.

1. Forzó a que la X tuviera unidades de $(\text{eV})^{1/2}$ en aras de ajustar mejor unos pocos enlaces más en su relación energía de enlace–polaridad de enlace original, con lo que se ha confundido siempre a los químicos innecesariamente;
2. Las electronegatividades de varios metales de transición violan la regla del Si, haciendo que los químicos se cuestionen si la X es realmente aplicable a esta clase de átomos;
3. Su definición de X (1960a) “la atracción por electrones de un átomo neutro en moléculas estables” ha sido mal interpretada por el 15-20% de los textos que discuten su escala, cuando explican que la X es una propiedad molecular intrínseca, aunque Pauling lo niegue implícitamente en la siguiente frase de su libro, y
4. La definición de Pauling no es viable en la mecánica cuántica porque está construida sobre propiedades termodinámicas y no sobre electrónicas, lo que implica una falta de capacidad para designar las electronegatividades de 18 elementos.

Años después, Allen (1994) proporcionó cinco criterios para establecer una definición coherente de X :

1. La X debe ser una cantidad de un átomo libre;
2. Debe responderse al problema de por qué la X no se puede medir en el laboratorio;
3. Una escala correcta de X debe ser cercanamente compatible con los valores de X empleados por los químicos prácticos al racionalizar sus resultados experimentales durante los últimos 70 años;
4. Se cree que alguna función de las energías de ionización de los electrones de valencia atómica es el mejor candidato para ser la propiedad física medible necesaria para definirla;
5. Una definición correcta de la X debe ser totalmente compatible y hacer una conexión directa con los métodos de

investigación de la mecánica cuántica, usados por los científicos profesionales para sus predicciones y explicaciones detalladas sobre la química contemporánea y los problemas de la física del estado sólido.

Referente al criterio 4, Pauling (1960b) afirma: “La propiedad de la electronegatividad de un átomo en una molécula es diferente del potencial de ionización del átomo y de su afinidad electrónica... aunque está relacionada a esas propiedades de una manera general.”

Boeyens (2008) establece sólo una regla. Explica que la forma moderna en la que se grafica la curva de Lothar Meyer (figura 1), del volumen atómico $V = M/\rho$ (la masa atómica en gramos y la densidad de los elementos sólidos), presentado como una función del número atómico (Z), demuestra convincentemente la periodicidad elemental y expresa la X atómica; Boeyens indica que si se interrumpe la curva en los puntos donde se sabe que se completan los niveles de energía s , p , d y f —en vez de conectar todos los puntos en la secuencia de Z —, ésta se fragmenta en regiones formadas por dos u ocho elementos, excepto para los de las tierras raras, pero que si se toman junto con el par de elementos precedentes (Cs y Ba) y se separa el segmento en el Sm, la curva queda dividida en dos segmentos de ocho elementos cada uno. Ahora, todos los segmentos son curvas que tienen, alternadamente, una pendiente positiva y otra negativa, lo cual es la base exacta para distinguir a los elementos tradicionalmente considerados como electropositivos y electronegativos. Esta noción teórica, dice Boeyens, provee una definición precisa de X y permite afirmar que las escalas que no reflejen esta periodicidad deben considerarse como inapropiadas.

Ideas pasaporte

En algunos de los trabajos revisados existen afirmaciones interesantes que nos permiten la movilidad y el ingreso a otras consideraciones, ya que muestran las inconsistencias referentes a la X :

1. La base física de la electronegatividad ha permanecido oscura... (Mulliken, 1934).
2. La propiedad cualitativa que los químicos llaman electronegatividad (Pauling, 1960c).
3. La propiedad de la electronegatividad de un átomo en una molécula... está relacionada a estas propiedades (potencial de electrodo, A e I) de manera general (Pauling, 1960d).
4. Después de muchas aproximaciones sigue habiendo confusión acerca de la imagen física que corresponde al término electronegatividad (Izkowski y Margrave, 1961).
5. Ya que la transferencia electrónica no es directamente observable, no existe un método adecuado para usar como base de una escala de electronegatividad (Hinze y Jaffé, 1962).
6. El concepto de electronegatividad... nunca se ha definido absoluta y adecuadamente (Hinze, Whitehead y Jaffé, 1963).

7. Se ha hecho un esfuerzo considerable en tratar de derivar valores universales cuantitativos de electronegatividad (sin resultados) (Wells, 1968).
8. La última meta de la química teórica es... entender a los átomos y su comportamiento completo... (Sanderson, 1976).
9. De entre todos los conceptos químicos cualitativos, la electronegatividad es uno de más útiles (Simons, Zandler y Talaty, 1976).
10. ...pocos conceptos son tan ampliamente usados o tan ambiguos... (Boyd y Markus, 1981).
11. Desafortunadamente, a diferencia del número atómico, la masa, la energía de ionización o la afinidad electrónica, la electronegatividad no es una propiedad de un átomo aislado, experimentalmente medible (Nagle, 1990).
12. La electronegatividad... es también uno de los parámetros atómicos menos satisfactorios, debido a la dificultad para producir una escala cuantitativa (Alcock, 1990).
13. A pesar de los considerables esfuerzos para establecer una definición clara y una escala común aceptable, no hay acuerdo sobre qué escala provee la mejor descripción de la electronegatividad, que ha permanecido como una guía cualitativa práctica (Ghosh, 2004).
14. La existencia de muchos y diferentes juegos de valores (de X)... ha llevado a una infortunada, pero ampliamente compartida visión contemporánea de que la X es un concepto inherentemente confuso y con bajo contenido de información por lo que, algunos químicos piensan, es indefinible (Allen, 1994).
15. La electronegatividad no es observable y por tanto no tiene un valor experimental (Ghosh y Gupta, 2005).
16. El concepto y la escala (de X) aún permanecen y permanecerán como una entidad científica cualitativa (Ghosh y Gupta, 2005).
17. Para determinar la electronegatividad se miden propiedades dependientes de la distribución electrónica (Noorizadeh y Shakerzdeh, 2008).
18. Lo que los químicos llaman electronegatividad es una propiedad cualitativa (Boeyens, 2008).

Observaciones, comentarios y consideraciones

Como en todo cuerpo del conocimiento que crece, existe mucha controversia alrededor de la X y casi nadie está de acuerdo con planteamientos diferentes a los suyos. De cualquier modo, el conocimiento generado sirve para poder trabajar más y explicar mejor; no estar de acuerdo o, lo que es lo mismo, no aceptar algo como verdadero es el fundamento de la ciencia. Sin embargo, enseñar química significa poder encontrar explicaciones simples y razonables a los conceptos químicos desarrollados y a sus interrelaciones, así como métodos para incrementar el entendimiento de los alumnos a través de visualizaciones. La trilogía presentada debe aportar en ambas actividades; cómo se haga dependerá de los intereses y capacidades de cada actor. También permite estimar el amplio rango de significados atribuidos a la X , ya que cada autor le

asigna uno; y la evolución del concepto, ya que se han planteado muchas hipótesis, argumentos, visiones, racionalizaciones, críticas y aplicaciones que han facilitado un avance en la conceptualización teórica de la X , en aras de concretar una definición viable y proveer una escala cuantitativa y universalmente aplicable y explicable. Pero esto depende del parámetro estructural, de la propiedad o de la relación de propiedades que se esté considerando, ya que cada una de ellas significa una interpretación diferente de la X , con lo que se tienen diferentes conceptos de electronegatividad. Por otro lado, se ha asignado un número, o un rango de ellos, a cada átomo, a través de una escala o un esquema de cálculo, que es la finalidad de la propuesta. Podemos notar que a lo largo del tiempo, se ha argüido para apoyar a la igualdad total o a la igualdad parcial de la X ; sostener algunas escalas en detrimento de otras; aplaudir unas ideas o señalar los errores de otras, o favorecer su conceptualización teórica o el éxito en su aplicación, que muestran la orientación y las preocupaciones más importantes de cada autor. Entre tanta diferencia, es posible distinguir dos acuerdos generales: a) la X indica la capacidad de atraer y conservar electrones, y b) en un enlace atómico los electrones se comparten en forma desigual.

El balance de los resultados obtenidos no ha sido totalmente satisfactorio, por lo que algunos de sus adeptos se han desencantando, mientras otros aprecian la utilidad de la X ; entre los últimos existen dos posiciones, los que piensan que será posible encontrar una escala universal y los que están convencidos de que es una propiedad o un concepto cualitativo.

Lo que se puede establecer es que:

1. Las propuestas se fundamentan en las diversas características atómicas (muy pocos en las moleculares): a) en parámetros de la estructura (muchas en el radio covalente o iónico), o b) en propiedades atómicas (la más utilizada es el potencial de ionización) y sus diversas correlaciones.
2. No existe una escala de X que acierte en un 100% en alguno de los usos propuestos.
3. Cada una de las escalas, o grupos de ellas con orígenes comunes, se relaciona mejor a una aplicación específica.
4. Al correlacionarse, las diferentes escalas se ajustan a una línea recta, presentando pocas diferencias en lo general; se observa que cuanto más común sea el origen de ambas menor será la desviación y mayor la correlación; las diferencias notorias se deben a las particularidades de la(s) propiedad(es) medida(s) a un conjunto de elementos parecidos entre sí; el que las correlaciones ajusten a una línea recta no debería de causar admiración, pues las características atómicas utilizadas para fundamentarlas están relacionadas por la misma tendencia, la periodicidad.
5. Cada escala de X presenta un porcentaje de éxito diferente (ninguno del 100%), en alguna aplicación específica; esto seguramente depende de la relación más o menos directa que tengan las características usadas para su fundamentación con esa aplicación; si ninguna es totalmente

exitosa en un solo campo, es difícil concebir una que lo sea en todos.

6. Si las escalas de **X** son relativamente exitosas en diferentes aplicaciones específicas, se debe a la relación cercana que esa aplicación tiene con la(s) característica(s) medida(s); por lo tanto, es importante definir bien cuál propiedad, o relación entre ellas, corresponde mejor a cada aplicación, explicación o uso determinado; por ejemplo, comúnmente se relaciona el punto de fusión con la resistencia del enlace y, aunque está relacionado, depende más de la estructura molecular; esto indica que se deben ponderar bien en una relación.
7. No se ha podido dar un significado absoluto a la **X**, porque los autores las han relacionado a diferentes propiedades —o relación de ellas—, con lo que se han obtenido tantos significados como propuestas existen.
8. No ha sido posible definir apropiadamente a la **X** como propiedad. Algunos autores han considerado que la **X** es un concepto o una entidad no observable y, por ende, no medible, lo que explica la falta de valores experimentales directos; entonces, se ha tratado de hacerla depender de diferentes propiedades y parámetros estructurales atómicos y, al tiempo, seguir considerándola como una propiedad; esto nos parece inadecuado y cabe señalar que, en las ideas pasaporte, cuando la establecen como propiedad la califican como cualitativa o bien, como término o concepto.

Los parámetros estructurales (la estructura atómica, en general), las propiedades y los comportamientos, características de las especies, pueden distinguirse en tres niveles: 1° el eléctrico; 2° el molecular, y 3° el macroscópico (*bulk*) (Jensen, 1998); en realidad Jensen no menciona los comportamientos ya que en el área de la química no suele distinguírseles específicamente. Estructura (**E**), propiedad (**P**) y comportamiento (**C**) están relacionados entre sí, para cada nivel; aunque también se considera que la **E** del nivel eléctrico, puede influir en la **E** molecular y en la macroscópica cuando, por ejemplo, los átomos se unen para formar una molécula y varias de éstas se unen en cadenas; también se considera que las **E** de un nivel pueden impactar a las **P**, de los otros niveles; no obstante, deseamos señalar que encontrar relaciones bien definidas entre los parámetros de la **E**, las **P** y los **C** —para un solo nivel— tiene sus problemas; enfrentar los que surgen al mezclar las características en los diferentes niveles es un asunto mucho más complicado, que puede llevar a malentendidos. En general, se acepta que la **E** determina las **P**, para cada nivel y, en el mismo sentido, las **P** permiten determinar los **C**. Por otro lado, una **P** es medible, tiene valores y unidades, mientras que un **C** no los tiene, porque representa una cualidad que indica cómo se comportará el átomo, ión, molécula o sustancia en un determinado ambiente; el **C** está en función de la **P**, depende de ella o de un conjunto de ellas, es valorable y definible sólo al comparar relativamente los valores de la **P**.

Para nosotros, si la **X** no es observable y no puede ser me-

didada directamente, se debe a que no es una **P** sino un **C**, determinado por una **P** o relación entre ellas. Es erróneo verla como una propiedad. Como es un comportamiento, lo más que se podrá obtener es una tabla comparativa de **X** (escala relativa cualitativa) que indicará cuál elemento será más electronegativo o electropositivo que otro, sin poder precisar qué tanto más. Si se le asigna a un elemento un valor de referencia, como lo hizo Pauling, por extensión se les podrán asignar valores a los demás, pero éstos estarán representando los valores de la **P** medida originalmente, no los del **C**. En apoyo a lo anterior, si no ha sido posible encontrar una escala de **X** de aplicación universal, sino sólo escalas que tienen el mayor éxito en una sola aplicación específica, se tendría que aceptar que es cada característica (propiedad o estructura o alguna relación entre ellas) la que mejor se relaciona a una determinada aplicación; verlo así optimizaría su uso.

Un ejemplo de la relación entre **P** y **C**, lo encontramos en el pH. Al medir el pH de una sustancia en disolución acuosa se está midiendo la concentración de iones H_3O^+ , en mol/L; las concentraciones se traducen a una escala logarítmica con valores del cero al 14 (generalmente); el valor del pH (la **P**), indica si la sustancia será ácida, básica o neutra (el **C**), con lo que se puede construir una escala cualitativa que indique si una sustancia es, relativamente, más ácida o básica que otra. Al respecto, la **X** no es tan simple, se le exige mucho más, tanto, como la amplitud cuantitativa y cualitativa de las explicaciones y aplicaciones a las que se le ha sujetado.

Consideramos que la prueba principal que debe superar una escala de **X** está en su ajuste a la realidad —la práctica de la química—; esto le permitirá predecir y explicar características de las sustancias, aunque sea de manera acotada; si no cumple con esta condición, los demás requisitos o reglas que se quieran establecer sobrarán. Encontrar una propiedad, o una relación entre ellas, que pueda ofrecer tanto una definición como una aplicación universales para la **X** parece imposible desde nuestra interpretación, ya que la experiencia apunta a que la **X** es un comportamiento; los éxitos en órdenes de relativo corto alcance apoyan esta visión. Aunque, nunca se sabe, la búsqueda se incita con los horizontes nunca vistos, pero imaginados.

Bibliografía

- Alcock, N. W., *Bonding and Structure*, Chichester, England: Ellis Horwood Limited, 17, 1990.
- Allen, L. C., Chemistry and Electronegativity, *International Journal of Quantum Chemistry*, **49**, 253-277, 1994.
- Allen, L. C., Electronegativity Is the Average One-Electron Energy of the Valence-Shell Electrons in Ground-State Free Atoms, *Journal of the American Chemical Society*, **111**, 9003-9014, 1989.
- Bartolotti, Absolute Electronegativities as Determined from Khon-Sham Theory. In: Sen, K. and Jørgensen, C. K., *Electronegativity*, 27-40, Heidelberg, Germany: Springer-Verlag, 1987.
- Boeyens, J. C. A., The Periodic Electronegativity Table, *Zeitschrift für Naturforschung*, **63b**, 199-209, 2008.
- Böhm, M. C., Sen, K. D. and Schmidt, P. C., Molecular Orbital Electronegativity, *Chemical Physics Letters*, **78**(2), 357-360, 1981.
- Boyd, R. J. and Markus, G. E., Electronegativity of the elements from a

- nonempirical electrostatic model, *Journal of Chemical Physics*, **75**(11), 5385-5388, 1981.
- Ghosh D. C. and Gupta, K., A New Scale of Electronegativity of 54 Elements of Periodic Table Based on Polarizability of Atoms, *Journal of Theoretical and Computational Chemistry*, **5**(4), 895-911, 2005.
- Ghosh D. C., A New Scale of Electronegativity Based on Absolute Radii of Atoms, *Journal of Theoretical and Computational Chemistry*, **4**(1), 21-33, 2004.
- Gordy, W., A Relation between Bond Force Constants, Bond Orders, Bond Lengths, and the Electronegativities of Bonded Atoms, *Journal of Chemical Physics*, **14**(5), 305-320, 1946.
- Hinze J., Whitehead, M. A. and Jaffé H. H., Electronegativity. II. Bond and Orbital Electronegativities, *Journal of the American Chemical Society*, **85**(2), 148-154, 1963.
- Hinze, J. and Jaffé, H. H., Electronegativity I. Orbital Electronegativity of Neutral Atoms, *Journal of the American Chemical Society*, **84**(4), 540-546, 1962.
- Izcowski, R. P. and Margrave, J. L., Electronegativity, *Journal of the American Chemical Society*, **83**(17), 3547-3551, 1961.
- Jensen, W. B., Logic, History, and the Chemistry Textbook. I. Does Chemistry Have a Logical Structure?, *Journal of Chemical Education*, **75**(6), 679-687, 1998.
- Jørgensen, C. K., Electron Transfer Spectra, in Stephen J. Lippard (editor), *Progress in Inorganic Chemistry* Vol 12, 101-158, New York, USA: John Wiley and Sons Inc., 1970.
- Klopman, G., A Semiempirical Treatment of Molecular Structures. I. Electronegativity and Atomic Terms, *Journal of the American Chemical Society*, **86**(8), 1463-1469, 1964.
- Luo, Y. and Benson, S. W., A New Electronegativity Scale for the Correlation of Heats of Formation between Hydrogen and Methyl Derivatives, *Journal of the American Chemical Society*, **111**, 2480-2482, 1989.
- Malone, J. G., The Electric Moment as a Measure of the Ionic Nature of Covalent Bonds, *Journal of Chemical Physics*, **1**, 197-199, 1933.
- Mande C., Desmukh, P. and Desmukh P., A new scale of electronegativity on the basis of calculations of effective nuclear charges from x-ray spectroscopic data, *Journal of Physics B*, **10**(12), 2293-2300, 1977.
- Mullay, J., Atomic and Group Electronegativities, *Journal of the American Chemical Society*, **106**(20), 5842-5847, 1984.
- Mullay, J., Estimation of Atomic and Group Electronegativities. In: Sen, K. and Jørgensen, C. K., *Electronegativity*, 1-26, Heidelberg, Germany: Springer-Verlag, 1987.
- Mulliken, R. S., A New Electroaffinity Scale; Together with Data on Valence States and on Valence Ionization Potentials and Electron Affinities, *Journal of Chemical Physics*, **2**, 782-793, 1934.
- Murphy, L. R. et al., Evaluation and Test of Pauling's Electronegativity Scale, *Journal of Physical Chemistry*, **104**, 5867-5871, 2000.
- Nagle, J. K., Atomic Polarizability and Electronegativity, *Journal of the American Chemical Society*, **112**, 4741-4747, 1990.
- Nelson, P. G., Comment on Sproul's Evaluation of Electronegativity Scales, *Journal of Physical Chemistry*, **99**, 14570, 1995.
- Noorizadeh, S. and Shakerzadeh, E., A New Scale of Electronegativity Based on Electrophilicity Index, *Journal of Physical Chemistry*, **112**, 3486-3491, 2008.
- Parr, R. G. and Pearson, R. G., Absolute Hardness: Companion Parameter to Absolute Electronegativity, *Journal of the American Chemical Society*, **105**, 7512-7516, 1983.
- Parr, R. G. et al., Electronegativity: The density functional viewpoint, *Journal of Chemical Physics*, **68**(8), 3801-3807, 1978.
- Pauling, L., *The Nature of Chemical Bond*, Ithaca, USA: Cornell University Press, a) 95, b) 89, c) 88, d) 89, 1960.
- Politzer, P. and Weinstein, H., Some relations between electronic distribution and electronegativity, *Journal of Chemical Physics*, **71**(11), 4218-4220, 1979.
- Ponec, R., Generalization of Electronegativity Concept, *Theoretica Chimica Acta*, **59**, 629-637, 1981.
- Robles J. and Bartolotti, L. J., Electronegativities, Electron Affinities, Ionization Potentials, and Hardnesses of the Elements within Spin Polarized Density Functional Theory, *Journal of the American Chemical Society*, **106**(13), 3723-3726, 1984.
- Salas, G., Ramírez, J. y Noguez, M., La incomprendida Electronegatividad (Trilogía) I. El Pensamiento en la electronegatividad Cualitativa, *Educ. quím*, **22**(1), 38-44, 2011a.
- Salas, G., Ramírez, J. y Noguez, M., La incomprendida Electronegatividad (Trilogía) II. Evolución en la Cuantificación de la Electronegatividad, *Educ. quím*, **22**(2), 155-161, 2011b.
- Sanderson, R. T., *Chemical Bonds and bond Energy*, 2nd edition, New York, USA: Academic Press, xi, 1976.
- Simons, G., Zandler, M. E. and Talaty, E. R., Nonempirical Electronegativity Scale, *Journal of the American Chemical Society*, **98**(24), 7869-7870, 1976.
- Simons, G., Zandler, M. E. and Talaty, E. R., Nonempirical Electronegativity Scale, *Journal of the American Chemical Society*, **98**(24), 7869-7870, 1976.
- Smith, D. W., Comment on "Evaluation and Test of Pauling's Electronegativity Scale", *Journal of Physical Chemistry A*, **106**, 5951-5952, 2002.
- Sproul, G., Electronegativity and Bond Type. 2. Evaluation of Electronegativity Scales, *Journal of Physical Chemistry*, **98**, 6699-6703, 1994.
- Sproul, G. D., Reply to "Comment on Sproul's Evaluation of Electronegativity Scales", *Journal of Physical Chemistry*, **99**, 14571, 1995.
- St. John, J. and Bloch, A. N., Quantum-Defect Electronegativity Scale for Nontransition Elements, *Physical review Letters*, **33**(18), 1095-1098, 1974.
- Vera, L. and Zuloaga, F., MSW-X α Calculations of Molecular Electronegativities for Copper Complexes in the Tetrahedral and Square-Planar Limits, *Journal of Physical Chemistry*, **88**, 6415-6420, 1984.
- Wells, P. R., Group Electronegativities, in Andrew Streitwieser Jr. and Robert W. Taft (editors), *Progress in Physical Organic Chemistry*, 111-145, Berkeley, USA: John Wiley & Sons, Inc., 1968.
- Zhang, Y., Electronegativities of elements in valence States and Their Applications. 1. Electronegativities of elements in Valence States, *Inorganic Chemistry*, **21**, 3886-3889, 1982.