

De fotógrafos a montañistas: los *paparazzi* del enlace químico

Sutil, escurridizo, como cualquier concepto científico, el enlace químico se rehusó muchos años a ser puesto en evidencia. Pero un grupo de fotógrafos, aventureros, montañistas de la ciencia, logró desentrañar sus secretos. Para ello, fue necesario fotografiar a las moléculas muy de cerca. Al interpretar esas fotos, se toparon con complicados relieves que encierran las propiedades del enlace químico.

Una historia de rupturas y reencuentros

Todo está hecho de materia. Los objetos que nos rodean, la ropa, los alimentos, nuestros cuerpos. Todo. Más aún, la materia está formada de diminutas partículas, llamadas átomos. Estos átomos se arreglan en infinidad de formas, colores y sabores, y le dan al mundo la cara que conocemos. La química se encarga de estudiar los mecanismos que regulan esas combinaciones y transformaciones entre los átomos. Para ello, esta ciencia se vale de un concepto muy útil: el enlace químico.

El enlace químico es la unión que existe entre dos átomos. Pero para entender esto, es necesario hacer un pequeño *zoom* al átomo. Al hacerlo, notaremos que cada átomo está formado de electrones que se mueven en torno a un núcleo, compuesto de protones y neutrones. Los electrones y los protones tienen carga opuesta y, por ello, se atraen. Por eso, los núcleos se acercan hasta cierta distancia, y los electrones se acomodan alrededor de ellos, manteniendo unido al átomo.

Estos arreglos de los núcleos conforman las moléculas que nosotros conocemos y de las cuales está constituida toda la materia; es decir, de lo que estamos hechos nosotros mismos y todo lo que nos rodea, lo que ingerimos en los alimentos o las medicinas y lo que respiramos. Y los responsables de que esas estructuras de núcleos sean resistentes son los electrones.

Pero en ocasiones algo externo trata de separar a un par de núcleos con tal fuerza que ni los electrones son capaces de mantener la estabilidad. Al separarse los núcleos, quedan libres uno del otro; sin embargo, eventualmente se encuentran



con otros núcleos, se acercan de nuevo y los electrones se reacomodan para volver a pegar esta nueva unión, este nuevo enlace. Al formar nuevos enlaces, se producen otras sustancias químicas, nuevas o ya conocidas. Por lo tanto, entender las reacciones químicas es conocer este proceso de uniones y rupturas.

Después llegaron los físicos

La química estudia todos los aspectos involucrados en la ruptura de un enlace químico y en la formación de uno nuevo: desde la manera en que se rompe el enlace, hasta las condiciones que permiten que el nuevo enlace perdure para aprovechar la nueva sustancia formada. Algo que nos interesa desde siempre es conocer cuánto esfuerzo hay que imprimirle a cada unión química para romperla. Para lograrlo, la física nos provee de una manera sencilla, pero eficaz, de medir lo fácil o difícil que es romper un enlace químico: la energía.

En términos prácticos, la energía cuantifica la capacidad de un agente externo para mover una partícula. Este concepto es muy útil porque se trata de la “moneda de cambio” de los fenómenos físicos. Cuando se acercan dos sistemas físicos lo suficiente, usualmente intercambian su energía. Por lo tanto, si queremos romper un enlace, la física nos dice que hay que acercar un objeto con una energía mayor para que done su energía a nuestro enlace y entonces seamos capaces de separar los núcleos en cuestión.

A pesar de que la estrategia estaba clara, fueron necesarios muchos años para que se llegara a una descripción precisa y útil de los núcleos y los electrones. Científicos como Niels Bohr (1885-1962), Erwin Schrödinger (1887-1961), Werner Heisenberg (1901-1976) y Louis de Broglie (1892-1987), entre otros, desarrollaron las bases de la física cuántica, la cual nos permite entender las maravillas del mundo de los objetos muy pequeños. Pero hoy nos concentraremos en algo muy particular: ¿qué nos puede decir la física cuántica de los enlaces químicos? La respuesta es: si nosotros proporcionamos un arreglo de núcleos, la física cuántica nos dice cómo se acomodan los electrones alrededor de los núcleos, y cuál es la energía de ese arreglo. Por lo tanto, si queremos estudiar la ruptura del enlace A-B, vere-

mos dos arreglos: uno en el que los núcleos A y B están cercanos entre sí, y otro arreglo en el que los núcleos están tan alejados que, para fines prácticos, están libres uno del otro. La diferencia entre esas energías es, precisamente, la energía necesaria para alejar esos núcleos y romper el enlace.

Ya hemos hablado de las bondades de la energía; sin embargo, no todo es miel sobre hojuelas. En la mayoría de las reacciones químicas, el proceso involucra la ruptura y formación de múltiples enlaces. Si le proporcionamos a la física cuántica el arreglo de los núcleos cuando forman los reactivos, y luego el arreglo cuando forman los productos, entonces la diferencia es la energía necesaria para llevar a cabo la reacción química completa. Es decir, la energía sólo proporciona una descripción global del proceso, pero no nos dice cuál es el costo de romper y formar cada uno de los enlaces involucrados. Esta limitación dejó de lado el concepto de enlace... hasta que la química se involucró en el problema.



Erwin Schrödinger

Y luego llegaron los químicos

Linus Pauling (1901-1994), inconforme con las limitaciones antes descritas, decidió proponer una descripción de los sistemas químicos que unía tanto la visión desde la física de la energía como las ideas químicas sobre el enlace. Este trabajo es conocido como la teoría del enlace de valencia. Su idea fundamental era resolver el problema de la física cuántica, pero partiendo de un supuesto previo: cuando dos núcleos distintos se acercan entre sí, sus electrones participan únicamente de dos maneras. O bien los electrones se dirigen hacia el otro núcleo, abandonando completamente su núcleo original, o bien se comparten, llenando el espacio que separa a los dos núcleos. El primer caso se denominó enlace iónico; y el segundo, enlace covalente.

De esta manera, fue posible utilizar los métodos de la física cuántica, pero a partir de una comprensión química del proceso: cada elemento químico cuenta con una cantidad específica de electrones. Conocer los procesos químicos consiste en entender las reglas del “préstamo” y “compartimiento” de electrones, que posteriormente se llevaría a los cálculos finos de la física cuántica.

Esta estrategia resultó útil para explicar muy bien algunos procesos químicos; sin embargo, para otros sistemas dio lugar a explicaciones incompletas, pues muchos enlaces no son simplemente iónicos o covalentes: a veces los enlaces tienen un poco de ambas cualidades y crean una amplia gama de posibilidades que están fuera de esta descripción. Para muchas personas en la comunidad química, el enlace químico pasó de ser el instrumento fundamental para entender las reacciones químicas, a ser sólo una imagen simple que ayuda a dar los primeros pasos para estudiar un sistema químico, pero que pierde su importancia frente a los métodos modernos y sofisticados de la física cuántica. Era necesario reivindicar el rol del enlace químico, retomar la visión de Pauling y llevarla más allá.

Al final, trabajaron todos juntos

A continuación, veremos una parte del panorama actual en torno al enlace químico. Esto ha sido un logro de muchas personas, que tuvieron que revisar los cimientos de la física cuántica para encontrar una

manera de explicar la realidad, en la cual las descripciones de la física y de la química se reconciliaran. Para entender uno de los capítulos de esta historia, es necesario ir al principio, cuando Richard Bader (1931-2012) decidió analizar el problema anterior desde la perspectiva de un experimento muy particular: en vez de suponer el arreglo de los electrones para hablar de donación o compartimiento, ¿por qué no determinar dónde se encuentran realmente los electrones en una molécula? ¿Es posible recuperar las ideas de Pauling al hacerlo? Para responder estas preguntas, es necesario hacer un experimento muy especial: tratar de fotografiar al electrón.

Cómo fotografiar al electrón

Para tomar una fotografía convencional, es necesario que la luz incida sobre una persona o un paisaje. El método consiste en recolectar la luz reflejada, que contiene toda la información de la imagen: los colores, las profundidades, las formas. Esta luz se retiene en una placa, en un papel o en un sensor dentro de un teléfono celular; después de algunas reacciones, la imagen queda impresa (o guardada en una memoria digital), y nos quedamos con un recuerdo perpetuo del momento.

Pero cuando queremos retratar al electrón con esa misma estrategia, es necesario tomar en cuenta unos cambios ligeros: primero, que el electrón es prácticamente invisible y, segundo, que los electrones ¡nunca se quedan quietos!

Te veo, no te veo

En el mundo de la fotografía, existen muy diversos efectos especiales. Uno de ellos consiste en retratar a una persona en un cuarto cuya iluminación ha sido modificada; esto es, cuando la luz que proviene del foco tiene un color peculiar. Esto permite retratar con mayor detalle algunos aspectos de la persona, y también hace que algunos colores “originales” sean muy poco perceptibles o desaparezcan.

Al fotografiar al electrón, sucede algo similar. Si intentamos utilizar luz convencional, en un “estudio” donde tenemos al electrón encerrado para su sesión fotográfica, el resultado de las fotografías será nulo. El

electrón es invisible ante esta luz. En parte, la razón de esto es que el electrón es tan pequeño, y su movimiento es tan intenso, que la luz de la lámpara no lo detecta.

Para que la luz detecte un objeto en cuestión, es necesario que pueda interactuar con dicho objeto. La luz visible está compuesta de ondas, las cuales tienen una determinada energía que, al contacto con el objeto, se transfiere. Resulta que el electrón, al moverse, posee una energía mucho mayor a la de la luz que incide sobre él; tanto, que la luz no es capaz de interactuar ni de detectar al electrón. Sería como querer golpear a una mosca lanzándole bolas de papel. La diferencia entre la velocidad (y energía) de las bolas de papel y de la mosca es tan alta que es prácticamente imposible que coincidan y que el papel sufra un cambio significativo al chocar con la mosca para que podamos detectar a la mosca estudiando las bolas de papel que le lanzamos.

Por lo tanto, fotografiar al electrón con luz convencional no es posible. Es necesario buscar un tipo de luz especial, cuya energía sea tan alta que compita con la del electrón y esto les permita interactuar. La luz que buscamos se trata de los rayos X. La disciplina encargada de la tecnología para detectar y fotografiar partículas de muy diversos tamaños y propiedades se denomina espectroscopía.

No te quedes quieto, arruinas la foto

Para tomar una foto convencional, también es necesario que la persona o el objeto se quede en una posición estática mientras la placa recoge la luz y genera la imagen. Si se mueve, la imagen que obtenemos es difusa, y la foto se ha arruinado. La cuestión es que el electrón es una partícula en perpetuo movimiento. De hecho, la física cuántica establece que no se puede seguir el movimiento del electrón; es decir, resulta imposible conocer su recorrido. En el mejor de los casos, es posible captar al electrón en diferentes instantes de tiempo. Como en otras ocasiones en la historia de la ciencia, esta limitación, que surgió como una enorme barrera inevitable, a la postre se convirtió en un reto que fue enfrentado desde una perspectiva distinta.

En términos simples, el reto es tomarle una fotografía al electrón. Sin embargo, cualquier sistema químico está compuesto de multitud de electrones

que se mueven todo el tiempo. Es como querer tomar una fotografía panorámica aérea de un grupo de niños jugando en el recreo: ninguno se queda quieto, y no se logra distinguir a un niño del otro. Sin embargo, pronto la comunidad física se dio cuenta de que existen dos diferencias fundamentales entre retratar a los niños y a los electrones. Primero, los niños podrían distinguirse e identificarse si se hace suficiente *zoom*, cosa que no puede suceder al fotografiar electrones. Segundo, los niños se mueven tomando decisiones impredecibles para el fotógrafo; por momentos se detienen, cambian de juego, todos corren en una dirección y, segundos más tarde, en otra. No hay un patrón que se distinga a menos que el fotógrafo baje a convivir con ellos y entienda las reglas del juego.

En cambio, los electrones forman siempre un patrón. De hecho, la física cuántica predice que cuando un sistema químico se equilibra, los electrones se siguen moviendo, pero forman un patrón que se mantiene. Por lo tanto, es mejor concentrar nuestros esfuerzos en tener un retrato del patrón que forman los electrones como conjunto, en vez de concentrarnos en un electrón a la vez. A ese patrón se le llama densidad de partículas, y como las partículas estudiadas son electrones, se le denomina densidad electrónica.

Para retratar la densidad de los electrones, es necesario tomar múltiples fotografías individuales y luego sobreponerlas para observarlas juntas. Al hacerlo, se notará que en algunas regiones siempre hay multitud de electrones, mientras que otros lugares se encuentran casi siempre vacíos. Al tomar más y más fotografías, el patrón se hace más claro, y esto nos permite saber con precisión cuál es la probabilidad de fotografiar a los electrones en cualquier punto del espacio. Al final del día, la imagen obtenida es un mapa que nos muestra en qué regiones del sistema químico hay más o menos electrones. Pronto veremos que ésta es toda la información que necesitamos para restablecer el puente entre el modelo químico de Pauling y los resultados de la química cuántica.

■ ■ ■ Revelar la fotografía: un paisaje escabroso

■ El “negativo” de la densidad electrónica se nos presenta como manchas de distinta intensidad. A mayor

intensidad de la mancha, mayor densidad de los electrones en ese punto. Para que esta imagen nos revele toda la información que deseamos desentrañar, es necesario buscar una manera sencilla de interpretarla.

En primer lugar, hay que aclarar que el mapa de la densidad electrónica son manchas en tercera dimensión (3D), como si fuera un holograma que hoy es tan común en las películas. Es similar a pensar en la densidad de una nube que está confinada en un cubo tridimensional. Para hacer más sencillo el estudio de estas manchas de la densidad electrónica, pensemos solamente en la densidad en un plano que corte al sistema. Por ejemplo, en el caso de un sistema químico plano, como el benceno, pensemos en el plano que atraviesa los núcleos de carbono e hidrógeno. Esto nos facilita la labor de entender la travesía que describiremos a continuación (véase la Figura 1). Si después de todo el estudio encontramos algo interesante, será posible estudiarlo en el mapa tridimensional completo, con un poco (o mucho) de imaginación.

Montañas y valles

Cuando se estudia la densidad electrónica en un solo plano, es posible visualizar el mapa de la densidad electrónica como un mapa topográfico. Es decir, podemos imaginar que nos encontramos en un lugar desértico, vacío, en el cual la altura del terreno corresponde al valor de la densidad en ese punto. Siguiendo con el ejemplo del benceno y el mapa del desierto, haremos un ejercicio mental.

En primer lugar, hay que decir que estamos estudiando el benceno, una molécula cuya fórmula es C_6H_6 . Nos visualizaremos caminando dentro del mapa de su densidad electrónica. Recordemos que este lugar tiene un relieve muy interesante: en las regiones donde la densidad electrónica es mayor, el suelo está a una mayor altura, y viceversa. Existen 12 puntos en los que la densidad es máxima; en otras palabras, el paisaje tiene 12 montañas, colocadas en dos capas en un arreglo hexagonal (véase la Figura 2).

Un topógrafo experto en este tipo de terrenos de la densidad de los electrones sabe perfectamente cómo interpretar esas montañas. Cada una corresponde a la ubicación de un núcleo atómico. Esto sucede porque la densidad electrónica es máxima en la cercanía de los núcleos; recordemos que los núcleos tienen carga opuesta a los electrones, y aunque los electrones se mueven muy rápido, los atraen.

Este topógrafo encuentra las 12 montañas, de las cuales, seis núcleos son de carbono y seis son de hidrógeno, colocados en un arreglo circular. Al centro del círculo, se encuentra un gran valle, una porción donde la altura es mínima (véase la Figura 2). Este lugar arroja información interesante sobre un efecto del benceno llamado aromaticidad. Pero no intentemos volar antes de correr, sobre todo en esta aventura del montañismo químico. En esta ocasión, dejaremos de lado el centro de nuestro benceno, pues nos interesa más lo que sucede en la cima de las montañas. Para continuar con nuestra exploración,

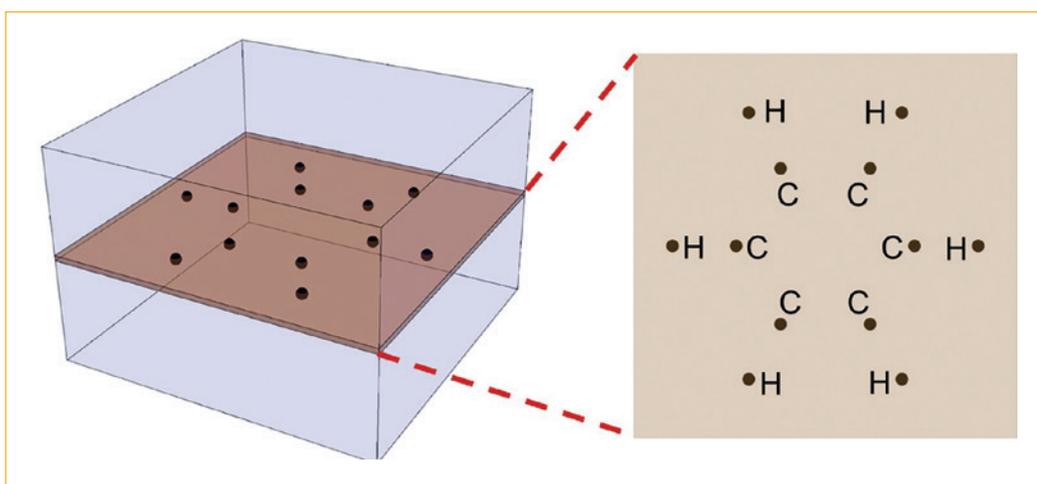


Figura 1. Para estudiar a la molécula de benceno, la colocamos en un espacio tridimensional. Luego, estudiaremos un segmento de todo el espacio, un corte que pasa por todos los núcleos de carbono e hidrógeno. Fuente: elaboración propia.

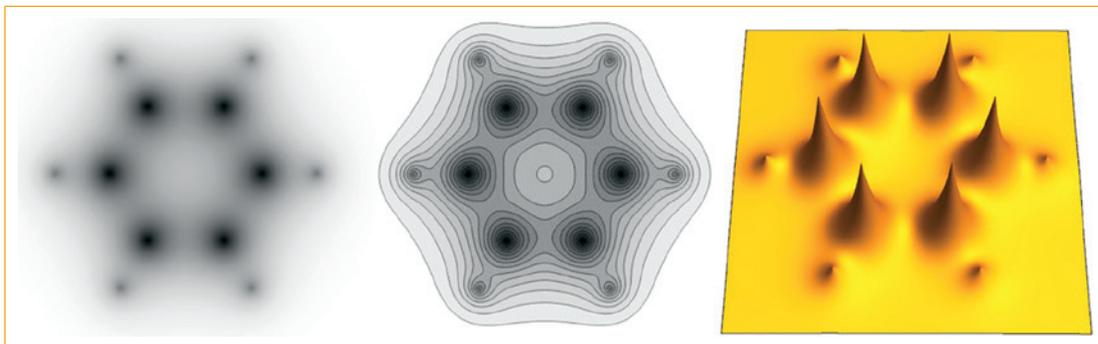


Figura 2. Densidad electrónica del benceno; en el extremo de la izquierda se muestra la densidad como un patrón de zonas oscuras (de alta densidad) y claras (de baja densidad). Para interpretarlo, se separa el mapa en regiones que tienen la misma densidad, como si fuera un mapa topográfico, mostrado al centro. Es posible representar la densidad en cada punto como una altura, y así obtener un paisaje tridimensional, como se aprecia en el extremo derecho. Fuente: elaboración propia.

vayamos allí y estudiemos cómo se ve la vida en la cima de la densidad electrónica.

El enlace es el camino

Estamos en la cima de la densidad electrónica. A nuestro alrededor, observamos una pendiente muy escarpada. Debemos caminar con cuidado, tratar de no tirar ninguna pertenencia, porque de hacerlo caerá sin detenerse, hasta el fondo. Pero como somos científicos o, lo que es lo mismo, exploradores y aventureros, surge la curiosidad de saber qué pasaría si caemos por la ladera de estas montañas.

En este paisaje del benceno, pronto nos damos cuenta de que cada montaña ofrece pocas alternativas. Si estamos parados en una montaña de carbono, entonces al tirar un objeto de prueba (digamos, una canica), lo más probable es que suceda lo siguiente: si la tiramos hacia el centro del círculo, entonces la canica rodará hasta el centro, hacia el lugar donde habíamos encontrado el valle central del benceno; o bien, si la tiramos hacia afuera del círculo, la canica rodará lejos de todas las montañas, lejos de todo, pues la densidad sigue disminuyendo siempre a medida que nos alejamos más y más de nuestro benceno. En pocas palabras, el destino de una canica que cae es acabar en el centro del benceno, o alejarse al infinito.

Sin embargo, al seguir observando la escarpada de la montaña, notamos algunas regiones muy pequeñas, pero peculiares. Parecen caminos que salen de la cima de la montaña de carbono; específicamente, son tres caminos. Si soltamos la canica justo en estos caminos, notamos que la canica no se va al

valle central ni se aleja del benceno. En vez de eso, la canica rueda siguiendo uno de los caminos, y nosotros la seguimos. Continuamos bajando hasta que la canica pasa por una altura mínima en ese camino. Como la canica lleva cierta velocidad, sigue su curso, pero ahora va subiendo por un camino escarpado. Empezamos a preguntarnos cuándo terminará el recorrido de esta canica de prueba.

Al caminar cuesta arriba siguiendo a la canica, empezamos a pensar en lo peculiar de la trayectoria. Sin darnos cuenta, la canica se detiene. Tomamos la canica, alzamos la vista y, por primera vez, notamos que nos encontramos nuevamente en la cima de una montaña. ¡Hemos llegado a otra montaña de carbono! Para ser exactos, hemos llegado a la montaña adyacente a aquella de la que soltamos la canica.

Miramos hacia atrás, el camino recorrido, y notamos algo interesante: sin fijarnos hemos caminado de una montaña a la siguiente, pero seguimos un camino asombroso. De no haber puesto los ojos en la canica, habríamos notado que teníamos una vista espectacular: hacia un lado del camino, veíamos el valle central y, hacia el otro, la llanura sin fin, que baja lentamente. Todo el paisaje está por debajo de nosotros. Hemos caminado de una montaña a la otra siguiendo la trayectoria de mayor altura posible.

Regresamos a la montaña de carbono de partida, y como recordamos que había otros dos caminos que podíamos seguir, repetimos el experimento. En el segundo camino, la canica llega a otra montaña de carbono; pero en el tercer intento, la canica llega a una montaña de hidrógeno. Por más que buscamos, no

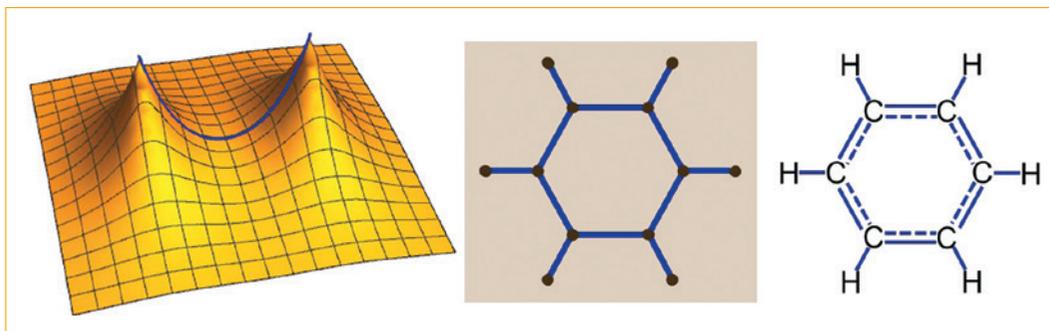


Figura 3. Caminos de enlace: en el extremo izquierdo, se muestra la trayectoria que une a dos carbonos adyacentes, la cual no tiene pendiente en la dirección que apunta al centro del benceno, por lo que no cae en dirección al centro. Fuente: elaboración propia.

hay otros caminos que salgan de la montaña de carbono donde empezamos. Estos caminos unen a nuestro carbono con otros tres núcleos, al parecer. Todo esto suena a algo que vale la pena estudiar sistemáticamente en el resto de los núcleos de nuestro benceno. Al repetir el experimento en la cima de todas las demás montañas, encontramos todos los caminos posibles. Éstos forman un arreglo que se muestra en la Figura 3.

■ ¿El final del recorrido?

■ Al observar los caminos en este paisaje del benceno, algo resulta evidente: las líneas y los puntos corresponden a una imagen que nos resulta familiar, que hemos visto en la escuela, en la clase de química. Es la estructura de la molécula de benceno. Pero en el pizarrón, las líneas del dibujo no corresponden a ningún valle, a ninguna montaña ni a ningún camino. Son algo más abstracto: estas líneas indican el enlace entre los carbonos y los hidrógenos en la molécula de benceno. Son los electrones compartidos que Linus Pauling estudiaba.

Al final del día, parece ser que Pauling tenía algo de razón: es posible relacionar la fuerza de un enlace con la densidad de los electrones en el espacio entre los núcleos, como si esta densidad se relacionara con la cantidad de electrones que participan en el enlace. Sin embargo, ahora esta descripción permite incluir también otro tipo de enlaces o interacciones, que anteriormente parecían parte del terreno de la imaginación química.

Al continuar la búsqueda de los caminos de enlaces químicos, se forma la estructura mostrada en el

centro de la Figura 3. Esta red de caminos corresponde a la estructura química del benceno, que aprendimos en la escuela. Pero en los caminos que encontramos no es posible notar si un camino corresponde a un enlace doble o sencillo. Nos damos cuenta de que los montañistas de la densidad electrónica se enfrentaron a este otro reto. Así, muchos conceptos químicos pueden asociarse a descripciones puramente geométricas, como las que acabamos de mencionar. Por ello, año con año se estudian nuevas y mejores maneras de entender el enlace químico.

Empezamos nuestra aventura sobre un mapa para imaginarnos cómo se vería la vida desde el panorama de la densidad electrónica. Al explorarlo, sin querer, hemos caminado por encima del enlace químico. Ahora que sabemos cómo es el terreno que estamos pisando, quizá pensemos que deberíamos llevar los tenis limpios la próxima vez, no sea que dejemos sucios los caminos que mantienen al benceno y a toda la materia unida y funcionando como la conocemos.

■ Ulises Torres Herrera

Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México.
ulisesstorresh@quimica.unam.mx

Lecturas recomendadas

- Bader, R. F. W. (1994), *Atoms in molecules: a quantum theory*, Oxford, Clarendon Press.
- Chamizo, J. A. (1995), "Linus Pauling...: el químico más importante de este siglo", *Educación Química*, 6(1): 64-70.
- Pauling, L. (1960), *The nature of the chemical bond*, Ithaca, Cornell University Press.