



La Ciencia, desde Morelos para el mundo

Todos los artículos publicados en esta sección de La Unión de Morelos han sido revisados y aprobados por el comité editorial de la Academia de Ciencias de Morelos, A.C., cuyos integrantes son: Dr. Enrique Galindo Fentanes (Coordinador), Dr. Edmundo Calva, Dr. Hernán Larralde, Dr. Sergio Cuevas y Dr. Gabriel Iturriaga
 ¿Comentarios y sugerencias?, ¿Preguntas sobre temas científicos? CONTACTANOS: edacmor@ibt.unam.mx

Química cuántica en la naturaleza y en el laboratorio

Ramón Hernández Lamonedá
 Centro de Investigaciones Químicas
 Universidad Autónoma del Estado de Morelos
 Miembro de la Academia de Ciencias de Morelos, A. C.

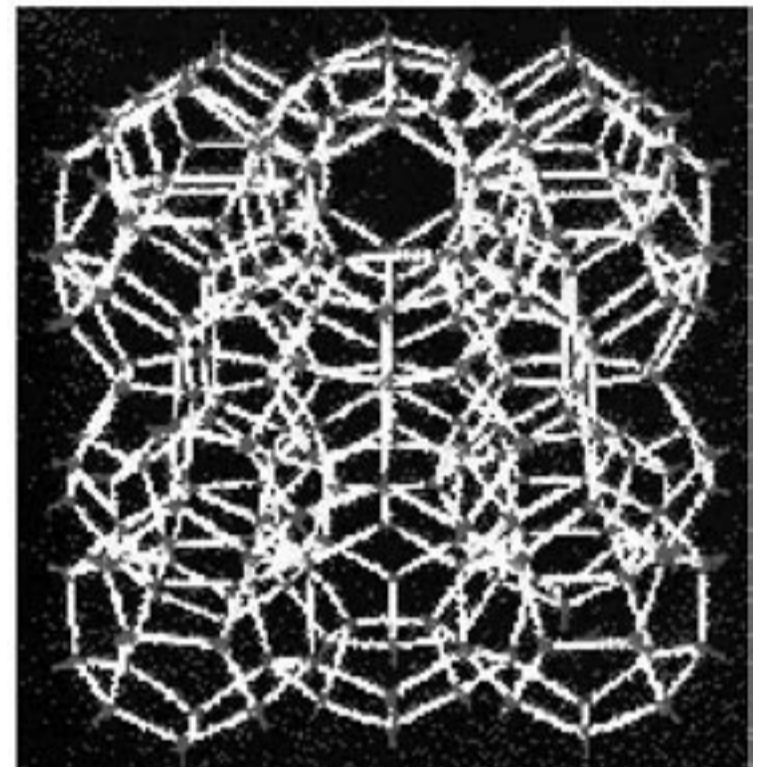
En los libros de texto que yo utilicé en secundaria se solía marcar el comienzo de la química moderna con los experimentos de Antoine Lavoisier (1743-1794) acerca de la conservación de la masa en las reacciones químicas. Indudablemente estos son una piedra angular para la parte experimental de la química. Algunos se preguntarán: ¿acaso no es la química 100 % una ciencia experimental? Aunque habrá distintas opiniones de los expertos, yo creo que la respuesta no es tan directa: A principios del siglo XX nació la descripción cuántica de la luz y la materia, indispensable para comprender y predecir las propiedades de átomos y moléculas. Una pieza central de la teoría cuántica es la ecuación de Schrodinger (ecuación que describe el comportamiento de las partículas a nivel atómico y subatómico) y cuya solución permite describir con todo detalle las propiedades de los sistemas cuánticos. Por ejemplo, su solución para el caso del átomo de hidrógeno permitió entender por primera vez la razón de ser de otra de las piezas clave de la química: la tabla periódica de los elementos. En mi opinión esto marca el comienzo de la química teórica moderna. Actualmente la investigación en química se ocupa de una va-

riedad muy amplia de procesos que pueden ir desde reacciones químicas elementales involucrando unos pocos átomos hasta reacciones que involucran varias etapas, miles de átomos y que ocurren en ambientes complejos como por ejemplo el interior de una célula. Todos estos procesos pueden estudiarse con las herramientas desarrolladas por la química teórica. En el caso de sistemas de unos pocos átomos, a través de la solución matemática de la ecuación de Schrodinger, es posible predecir sus propiedades con un grado de detalle que reproduce los datos obtenidos de los experimentos más sofisticados realizados a la fecha. Conforme aumenta la complejidad del sistema molecular bajo estudio es necesario recurrir a aproximaciones que limitan la exactitud de las predicciones pero que muchas veces dan lugar a una comprensión de los fenómenos que no se podría obtener de otra forma.

Mi área de interés es el estudio detallado de la estructura e interacción de las moléculas, los procesos de absorción y emisión de luz por moléculas (espectroscopía molecular) y los procesos de transferencia de energía en colisiones moleculares incluyendo las reacciones químicas. Nuestros estudios permiten analizar los movimientos moleculares tales como rotación, vibración y disociación, así como las excitaciones de los electrones asociados a las moléculas. El análisis de estos procesos se reduce a la solución de la ecuación de Schrodinger y en este sentido

nuestras herramientas teóricas están basadas en principios físicos y métodos matemáticos para resolver ecuaciones. A continuación describo algunos ejemplos concretos de mis líneas de investigación:

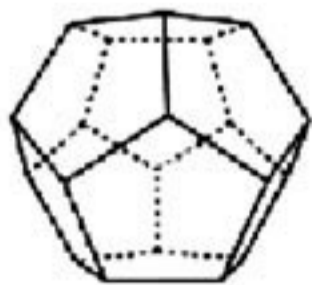
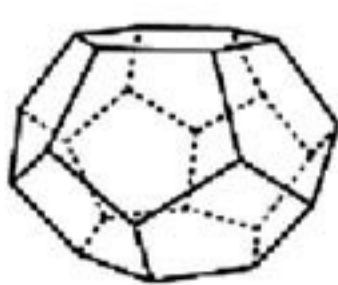
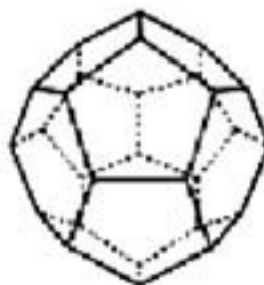
TRANSFERENCIA DE ENERGÍA EN COLISIONES DE OXÍGENO MOLECULAR: El oxígeno molecular es el segundo componente en abundancia en la atmósfera y es vital para la vida en la tierra. Su relevancia se extiende a otras propiedades de la atmósfera como la luminiscencia nocturna (debida a la recombinación de átomos y subsecuente emisión de luz) y la formación de ozono, componente de la capa que nos protege de los rayos ultravioleta al producirse su fotodisociación (disociación de la molécula tras la absorción de luz). Podría esperarse que dada la aparente simplicidad de estos sistemas y su importancia, ya deberían conocerse con lujo de detalle todas sus propiedades. Sin embargo, este no es el caso y todavía hay preguntas abiertas que son tema de investigación de frontera. En la década de los 90 un problema de gran importancia era la caracterización de los procesos que forman y destruyen ozono en la estratosfera. Nuestros cálculos mostraron que la velocidad de reacción de moléculas de oxígeno altamente excitadas vibracionalmente para formar ozono es muy lenta para competir con otros procesos de transferencia de energía y por lo tanto no juega un papel en la concentración de ozono estratosférico. Más recientemente, en



Clatratos: celdas poliédricas formados por moléculas de agua que pueden atrapar pequeñas moléculas gaseosas en su interior.

colaboración con investigadores del CSIC (Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Madrid, España), hemos predicho el mecanismo principal que permite transferir la energía vibracional a energía electrónica entre moléculas de oxígeno y esperamos esto sea confirmado en estudios experimentales realizados en el laboratorio. En el caso del nitrógeno, procesos similares juegan un papel en el fenómeno de las auroras. Desde un punto de vista de generación de nuevo conocimiento, el estudio detallado de sistemas moleculares pequeños ha permitido el descubrimiento de interesantes efectos, como por ejemplo el que la velocidad de algunos procesos aumente al disminuir la temperatura, contrario a lo que ocurre en la gran mayoría de casos. De hecho, el estudio de las propiedades moleculares en condiciones ultrafrías es un área reciente de gran interés dada la posibilidad de descubrir nuevas propiedades moleculares en estas condiciones extremas. Por ultrafrío se entiende temperaturas que se pueden conseguir en el laboratorio (milésimas de grado Kelvin por encima del cero absoluto o menores) y que son mucho menores que las del vacío en el espacio interestelar.

LARES Y ESPECTROSCOPIA EN LA INTERACCIÓN DE DIHALÓGENOS (CLORO, BROMO, YODO) Y AGUA: El concepto de fuerza intermolecular es central para la descripción microscópica de una amplia variedad de fenómenos naturales. Como su nombre lo indica son las fuerzas responsables de asociar a las moléculas y en términos macroscópicos se pueden relacionar con una variedad de procesos cotidianos, como por ejemplo, la condensación del vapor de agua o el hecho de que el agua y el aceite no se mezclen. Recientemente hemos iniciado una colaboración con investigadores de la Universidad de California (Irvine) en Estados Unidos, para caracterizar la interacción de moléculas de dihalógeno con moléculas de agua. La interacción entre las mismas presenta características especiales que han justificado el bautizarlas con el nombre de 'enlace de halógeno' en analogía al famoso 'enlace de hidrógeno' responsable de las propiedades únicas del agua y de la estructura de proteínas y ácidos nucleicos. Una de nuestras principales motivaciones es ampliar nuestro conocimiento de los llamados hidratos gaseosos o clatratos. Estos sólidos se constituyen de celdas poliédricas (dodecaedros y otros derivados del mismo)

5¹²5¹²6²5¹²6⁴

Clatratos: el mayor depósito natural de metano en los océanos, se encuentra en esta forma.

FUERZAS INTERMOLECU-

ACADEMIA DE CIENCIAS DE MORELOS, A.C.



formadas enteramente por moléculas de agua y cuyos vértices se unen precisamente por enlaces de hidrógeno entre moléculas de agua. Estas estructuras no son estables por sí mismas, es decir, se transforman de manera espontánea en hielo. Sin embargo, al atrapar pequeñas moléculas gaseosas en el interior de las celdas se convierten en estructuras estables. Los llamados *clatratos de halógeno* se conocen desde 1811; sin embargo, solo recientemente se han iniciado estudios espectroscópicos detallados que permitirán conocer sus propiedades estructurales y dinámicas. Por medio de herramientas teóricas podemos calcular las propiedades de estos clatratos, ayudar en la interpretación de los espectros (el espectro de un sistema muestra la intensidad con la que este absorbe luz de distintas frecuencias) obtenidos en el laboratorio y hacer nuevas predicciones de su comportamiento. Además del interés propio en estos sistemas desde el punto de vista de ciencia básica, otra fuente importante de motivación es que el mayor depósito natural de gas metano se encuentra en forma de clatratos en los océanos. Este hecho, por un lado, representa un peligro al considerar que cambios de temperatura podrían desestabilizar a los clatratos, liberándose el metano con consecuencias catastróficas, y por otro lado, representan la posibilidad de explotar la fuente natural más importante de este gas. Análogamente hay mucho interés en utilizar a los clatratos como medio de transporte de combustibles o para atrapar gases que causan el efecto invernadero, tal como el dióxido de carbono. Espero que esta breve introducción a mis líneas de investigación haya mostrado la amplitud de temas que pueden abordarse con las herramientas de la química teórica, incluyendo la descripción de nuevas y fascinantes propiedades moleculares así como su relación con problemas de interés en ciencia aplicada.

Para actividades recientes de la Academia y artículos anteriores puede consultar: www.acmor.org.mx

Curso Iberoamericano de Formación de Agentes de Cultura Científica

2.^a edición / marzo - diciembre de 2010

Este curso está dirigido profesionales laboralmente adscritos a una institución pública o privada, que desarrolle entre sus actividades principales la promoción de la cultura científica, la comunicación institucional, la divulgación o la transferencia del conocimiento, y la gestión de proyectos de I+D+i en universidades, centros o institutos de investigación, parques científicos, oficinas de transferencia del conocimiento, etc.

El plazo de matriculación termina el 28 de febrero de 2010.



www.oei.es/cursoagentes

Coordinan

Organização dos Estados Ibero-americanos



Para a Educação, a Ciência e a Cultura

Organización de Estados Iberoamericanos

Para la Educación, la Ciencia y la Cultura



CENTRO DE ALTOS ESTUDIOS UNIVERSITARIOS
CENTRO DE ALTOS ESTUDOS UNIVERSITÁRIOS

Colabora

