

# Un puente entre la física y la química

José Sergio Durand Niconoff,  
Samuel Cruz Sánchez\* y Óscar García Barradas\*\*



principios del siglo xx se estableció un puente entre las fronteras de la física y la química en un esfuerzo por explicar el enlace químico, esto es, las causas respon-

sables de que los átomos se unan para formar moléculas, dando lugar así a una nueva disciplina científica que se conoce actualmente como *química cuántica* (en lo sucesivo QC), área ya desarrollada considerablemente en su fundamentación teórica, pero cuyas aplicaciones tardaron en llegar hasta finales del mismo siglo. Su aplicación a la solución de problemas prácticos está íntimamente ligada al desarrollo de la computación, de modo que se pueden manipular los modelos matemáticos de la mecánica cuántica cuando se aplican a los sistemas moleculares, lo que ha revolucionado el desarrollo de la física y de la química.

La química es una disciplina científica que estudia la materia y sus transformaciones. En este sentido, su problema central son las estructuras y propiedades de las entidades químicas fundamentales: las moléculas, que están formadas por átomos en una composición y arreglo espacial bien definidos. El porqué y el cómo es así fueron preguntas que se plantearon los químicos desde que Dalton propuso sus leyes empíricas. A finales del siglo XIX ya estaban familiarizados con las reglas que describen la formación de moléculas y iones a partir de sus constituyentes.

Tales reglas se basan en el concepto de *valencia*, término usado para describir la capacidad que tienen los átomos para combinarse unos con otros y formar moléculas. Muchos hombres de ciencia, como Couper, Kekulé y Butlerov, desarrollaron en 1861 la teoría estructural de la química orgánica basados en ese concepto,

el cual ha sido de gran utilidad para que los químicos puedan interpretar sus resultados experimentales y planear nuevos experimentos.

Después del descubrimiento del electrón por J. J. Thomson en 1897, los científicos sugirieron que los átomos se pueden unir debido a las fuerzas eléctricas resultantes de la transferencia de un electrón de un átomo a otro. G. N. Lewis propuso en 1916 la posibilidad de que un electrón fuera "compartido" por dos átomos a cambio de la estabilidad de ambos. El concepto de *enlace químico*, basado en intercambiar o en compartir la carga eléctrica electrónica, es un concepto estático-cualitativo cuyo éxito para la comprensión de algunos aspectos centrales de la química es indiscutible, lo mismo que sus limitaciones, tal y como las tiene cualquier otro modelo.

El año de 1926 marca el comienzo de una nueva era en la física y la química. El físico austriaco Erwin Schrödinger introduce la MC, con lo que supera una descripción estática-pictórica mediante un modelo matemático-dinámico del enlace químico.

En el periodo transcurrido entre 1926-1929 se construyen los cimientos del mencionado puente entre la física y la química: la química cuántica. El 17 de diciembre de 1926, O. Burrau, por invitación de Niels Böhrr, presenta ante la Real Academia Danesa de Ciencias el trabajo titulado *A calculation of the  $H_2^+$  ion in its groundstate*, cuya importancia radica en que muestra la consistencia teórico-experimental entre un cálculo teórico basado en la QC y los resultados experimentales del enlace químico

\* Instituto de Ciencias Básicas de la Universidad Veracruzana, Dr. Luis Castelazo Ayala s/n, col. Industrial Ánimas, 91190. Xalapa, Ver., México, tel. (228)812-57-45, correo electrónico: sdurand@uv.mx.

\*\* Unidad de Servicios de Apoyo en Resolución Analítica (SARA) de la Universidad Veracruzana, Dr. Luis Castelazo Ayala s/n, 91190. Xalapa, Ver., México.

entre dos núcleos de hidrógeno. El trabajo de Burrau se publica en marzo de 1927. Tres meses más tarde, en junio, aparece el texto de Heitler y London, al cual se conoce como la piedra angular de la química. En él se halla la formulación matemática-dinámica del enlace covalente de Lewis, se introduce lo que posteriormente se conocerá como el "método de enlace de valencia", y también se resuelve el problema del enlace en una molécula de hidrógeno. Por su parte, el científico norteamericano E. U. Condon resuelve en el mismo año el problema de la molécula de hidrógeno utilizando QC y creando lo que actualmente se conoce como el "método del orbital molecular".

J. C. Slater trabajó en la solución del problema de construir funciones de onda asociadas a sistemas de muchos electrones en las que se incorporaran las ideas de simetría de Heisenberg y Dirac con el propósito de hacer estudios prácticos de espectroscopía. Slater descubrió además que la introducción desde el principio de un cálculo del *spin* electrónico y la función de onda en forma de determinante –conocido como el "determinante de Slater"– simplificaba enormemente el trabajo. Sus resultados se publicaron en 1929.

Especial importancia reviste el trabajo desarrollado conjuntamente por el matemático inglés Douglas Hartree y el físico ruso Vladimir Fock. A partir de 1929 producen la teoría del campo autoconsistente –a la que hoy día se conoce como la "teoría de Hartree-Fock"– para poder estudiar sistemas moleculares con muchos electrones. Estos trabajos son algunos ejemplos del comienzo, hace ya más de setenta años, de lo que se denomina QC.

Desde el punto de vista práctico, manipular la matemática inherente a la aplicación de la QC para describir el comportamiento de moléculas "más grandes" que la del hidrógeno resultó, para aquella época, imposible. Tal problema fue

planteado en 1929 de manera magistral por el físico inglés P. A. M. Dirac en su famoso enunciado acerca de lo que todo físico siente que es cierto y todo químico teme que pueda serlo: "Las leyes fundamentales necesarias para el tratamiento matemático de gran parte de la física y la química entera son completamente conocidas, y la dificultad reside sólo en el hecho de que las aplicaciones de estas leyes conducen a ecuaciones que resultan demasiado complejas para ser resueltas".

En la actualidad, tal dificultad ya se ha superado hasta cierto punto debido al avance de la computación, pero aún existe lo que se podría llamar la dificultad conceptual: la incredulidad de obtener buenos resultados al utilizar una computadora como única herramienta de investigación. ¿Cómo es posible obtener conocimiento de un mundo molecular complejo mediante ajustes matemáticos en vez de observar ese mundo directamente?

Se debe entender que la química cuántica no tiene como objetivo sustituir al experimento; debe verse y aceptarse como una herramienta más del estudio de las moléculas que, junto con la teoría y el experimento, puede aportar mucho al conocimiento de la naturaleza.

El aspecto revolucionario de la química cuántica es que no estudia a las moléculas directamente, lo que contrasta con la práctica observacional-descriptiva tradicional de la química. En efecto, el énfasis de tal práctica privilegia la observación sobre la teoría, pero, de hecho, la práctica de la química cuántica contradice lo ya aceptado: que el conocimiento científico debe obtenerse a partir de la observación; sin embargo, desde 1960 tal privilegio tendió a desaparecer con base en lo que en ese año fueron las nuevas ideas de la filosofía de la ciencia.

Por otro lado, el rechazo de la química cuántica también se fundamenta en la oposición a la tendencia de reducir la química a la física. Este punto, creemos, es un tema que estará a discusión por siempre; aun así, los éxitos y la práctica de la química cuántica indican que hay un lugar en la química para una forma "amable" de reduccionismo.

El programa de la química cuántica se podría indicar de la siguiente manera:

Una molécula en un estado particular de sus electrones puede existir de acuerdo con varios arreglos geométricos de sus núcleos; cada uno de estos arreglos está asociado con un conjunto particular de fuerzas entre núcleos y electrones (energía potencial) de la molécula. Un mapa de estas fuerzas, dibujado en

función del arreglo nuclear para un estado electrónico dado, se llama *superficie de energía potencial*. Toda la información de la estructura y la energía molecular y el comportamiento dinámico de la molécula está contenida en las superficies de energía potencial. Las superficies de energía potencial (las fuerzas que actúan dentro de una molécula) se pueden construir mediante el formalismo de la MC. Por consiguiente, la información acerca de la estructura y propiedades de las moléculas, así como su relación, se puede determinar mediante tal formalismo.

La aplicación del método de la química cuántica en etapas tempranas dio la impresión de que se trataba esencialmente de interpretar más que de descubrir hechos químicos. En el año de 1970, Albert Pullman comentaba: "Da la impresión de que su objetivo esencial es reproducir mediante métodos inciertos resultados conocidos, en contraste con otras ciencias cuya meta es usar métodos bien definidos para la búsqueda de verdades desconocidas".

De manera irónica, es también en 1970 que se establece por primera vez que la mecánica cuántica molecular puede producir cálculos lo suficientemente exactos como para dar resultados antes, y, por lo tanto, motivar al experimento: el caso conocido como el "paradigma del metileno". Entre 1962 y 1970 existía el acuerdo científico de que la molécula de metileno era lineal, tal y como concluyó, a partir de resultados experimentales, el brillante espectroscopista G. Herzberg. Pero el cálculo de Bender y Schaefer basado en la OC sugirió que la estructura de metileno no era tal, sino que sus enlaces formaban un ángulo de  $136^\circ$ . Rápidamente apareció evidencia experimental consistente con tal estructura del metileno, seguida por una reinterpretación de los resultados espectroscópicos que confirmó lo predicho por la teoría. Este hecho es trascendental en la química cuántica al evidenciar que la teoría puede estar a la par del experimento en la búsqueda de verdades desconocidas, y al mismo tiempo contribuye con evidencia a la confiabilidad de la aplicación de la mecánica cuántica molecular en la química.

Únicamente en el grupo del profesor Schaefer hay por lo menos 23 casos en los que las conclusiones experimentales fueron revisadas para concordar con las predicciones teóricas. En palabras de Schaefer:

La química cuántica computacional es un compañero amablemente reduccionista que sirve para experimentar, en el mismo sentido que un potente espectrómetro de resonancia magnética nuclear es también un compañero valioso para el químico de síntesis orgánica

e inorgánica. No esperamos que los conceptos químicos fluyan de la computadora, de la misma manera que no esperamos que lo hagan directamente de la máquina de resonancia magnética nuclear. Sin embargo, cuando son puestos en las manos de un buen químico intuitivo, ambos dispositivos producen los datos a partir de los cuales puede ser obtenido el entendimiento significativo de la naturaleza.

Un ejemplo más basado en resultados experimentales: hasta 1978 se aceptó que la glicina tenía un conformero con estructura estable determinada; pese a ello, el cálculo teórico de Vishveshwara y Pople predijo la existencia de otro aún más estable, pero posiblemente más difícil de detectar por tener un momento dipolar mucho más pequeño. No fue sino hasta 1980 que Suenram y Lovas reportaron haber detectado tal estructura predicha por la teoría. Este resultado es de mucha importancia para la detección de la glicina en los medios interestelares, con las consiguientes implicaciones en el origen de la vida.

El problema central en las aplicaciones de la química cuántica es el de resolver la ecuación de Schrödinger. Hoy día se cuenta con dos metodologías para hacerlo. Una de ellas utiliza el concepto de *función de onda*, y la otra —algo así como "la hermana menor"— se basa en la teoría de la funcional de la densidad. En 1964, Hohenberg y Kohn demostraron que si la "hermana menor" se conduce adecuadamente, se obtiene exactamente la misma información que con su "vieja hermana", con la gran ventaja de que la funcional de la densidad es mucho más fácil de instrumentar computacionalmente.

El trabajo teórico posterior del físico austriaco W. Kohn sobre la teoría de la funcional de la densidad sienta las bases para simplificar dicha instrumentación computacional para resolver la ecuación de Schrödinger al proponer que no es necesario considerar el movimiento de cada electrón individual dentro de una molécula, pues

basta conocer el número promedio de electrones localizados en un punto en el espacio. Ello hace posible estudiar moléculas "muy grandes", cuyo tratamiento con la teoría de la función de onda es, aun para nuestros días, prácticamente imposible de hacer.

Se debe al matemático inglés John Pople el diseño de los algoritmos matemáticos y los programas de cómputo que ayudan a resolver la ecuación de Schrödinger y que incluyen desde principios de los años noventa los relacionados con la teoría funcional de la densidad. Por estas contribuciones, ambos, Khon y Pople, fueron galardonados con el premio Nobel de Química en 1998.

Actualmente, la MC, junto con los métodos computacionales para resolver la ecuación de Schrödinger, permiten hacer simulaciones de procesos químicos que involucran compuestos ya conocidos apoyándose en modelos muy confiables, además de que predicen los de algunos otros formados con moléculas que apenas serán creadas artificialmente en el futuro.

Entender cómo responden los enlaces químicos entre las distintas moléculas de un compuesto ha sido un sueño largamente perseguido por científicos en campos que van de la biología molecular a la industria farmacéutica, pasando por la astroquímica. El puente construido entre la física y la química hace más de setenta años permite que el sueño vaya siendo realidad al tener amplias posibilidades de aplicación en campos del conocimiento que abarcan los de relevancia industrial y biomédica, el diseño de fármacos y hasta el análisis de la estructura de moléculas interestelares de importancia en la radioastronomía.

Figura 1. Diagrama de flujo de la química cuántica computacional. El proceso de determinar la estructura molecular optimizada y sus propiedades no utiliza una sustancia real.



Figura 2. Diagrama de flujo para obtener una medida química típica, en contraste con el de la química cuántica.



Representación del metileno

