

La raya por la que se intuyeron las moléculas

Edgar Vargas

*Me encuentro bien entre marginados
porque soy un marginado.*

Charles Bukowski.

Kekulé y el señor de los anillos de benceno

Uno de los pilares fundamentales de la química actual es el concepto de enlace químico del que se deduce la idea de que la estructura molecular –o la manera en que están enlazadas las moléculas– define las propiedades de las sustancias. Para poder estudiar cómo se fueron creando las ideas sobre los átomos que dieron origen a la concepción de las estructuras moleculares hay que remontarse a mediados del siglo XIX y citar nombres como Berzelius, Dumas, Laurent, Kekulé y muchos otros.

No hay libro de química, ni químico que no sepa que a August Kekulé se le ocurrió la brillante idea de que los átomos de carbono en el benceno (fig. 1) se unen formando un anillo. Cuenta la leyenda que una tarde mientras dormitaba “vio”

una serpiente que se mordía la cola y de ahí le surgió la idea. Ésta fue una audaz sugerencia sobre cómo podían unirse los átomos de carbono en tiempos en los que ni la teoría atómica ni la molecular estaban totalmente aceptadas por los científicos ni existían métodos físicos para verificarlas, eran sólo intuiciones. Cuando comenta este hecho un profesor de la Facultad de Química de la UNAM dice que Kekulé más bien sufrió los efectos de inhalar alguna sustancia en el laboratorio.

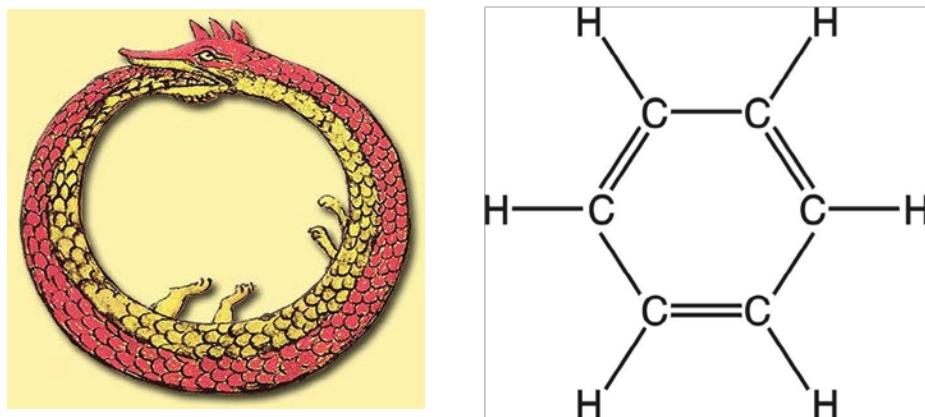


Figura 1. A la izquierda una de las posibles visiones de Kekulé y a la derecha una representación de la estructura del benceno.

Realmente no es muy sorprendente la idea de Kekulé cuando uno se entera que pocos años antes ya se había propuesto que los átomos de carbono se pueden unir hasta con otros cuatro átomos de carbono o de otros elementos. Al número de enlaces de un átomo se le llamó posteriormente valencia y años más tarde ésta se pudo determinar para otros elementos. Pero este señor no es el pretexto de estas líneas, sino otra persona marginada por la historia, alguien que proporcionó al mundo una herramienta eficaz para manejar certeramente, con una simple raya, la noción del enlace químico, y que hizo evidente que el carbono era tetravalente; es decir, con capacidad de unirse hasta con cuatro entidades distintas, incluyendo otros átomos de carbono. El señor de quien quiero hablarles se llamaba Archibald Scott Couper (fig. 2).

De Glasgow a París con escala en Berlín

Scott Couper nació el 31 de marzo de 1831, en Kirkintilloch, Escocia. Allí, en Edimburgo, empezó en 1852 sus estudios en filosofía y en 1854 se trasladó a Berlín donde se empezó a interesar en la química. Pero para desarrollarse en este campo se fue a París al laboratorio encabezado por Adolphe Würtz, otro de los pilares de la química del siglo XIX.



Figura 2.- Archibald Scott Couper, probablemente en París hacia 1859.

La era de la confusión

Cuando John Dalton introdujo su teoría atómica a principios del siglo XIX, surgieron muchas confusiones entre los químicos de la época. Los pesos atómicos que se manejaban eran erróneos y variaban según las distintas publicaciones; por lo tanto los pesos moleculares también eran indefinidos. Esto hacía confusa la distinción entre átomos y moléculas. Además, la teoría dual sugerida por Berzelius, que se apoyaba en los experimentos electroquímicos de Davy, establecía que una molécula se *construía* por la interacción de dos partes, una positiva y otra negativa. Había

que buscar en cada molécula de la sustancia analizada o sintetizada, la parte positiva y la parte negativa. Por ejemplo se consideraba que en las moléculas orgánicas la parte positiva siempre era uno de los átomos de hidrógeno y que el carbono aportaba la parte negativa. El problema surgió cuando descubrieron que átomos de cloro –generalmente considerados como negativos– podían sustituir en las moléculas orgánicas ¡a los hidrógenos!

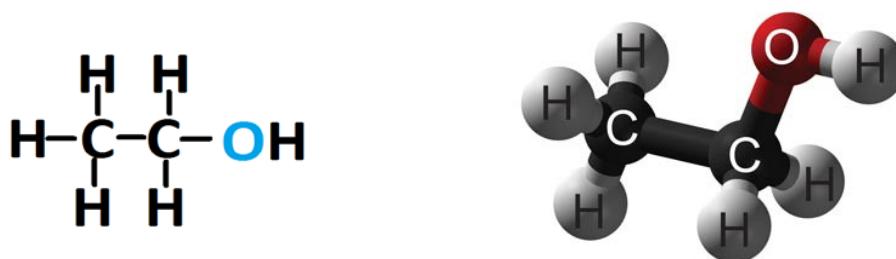


Figura 3.- Representación gráfica del etanol $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{-O-H}$. A la izquierda se resalta una representación clásica. A la derecha una representación tridimensional hecha con un programa computacional.

Otra forma de explicar la construcción de las moléculas fue la teoría de los tipos propuesta por Charles Gerhardt. Ésta establecía que los compuestos podían clasificarse de acuerdo con las reacciones características de un átomo base. Por ejemplo, en los compuestos tipo agua, el átomo base era el oxígeno y cualquiera o ambos hidrógenos podían ser sustituidos por grupos de átomos llamados radicales orgánicos. Así, para formar el etanol se sustituía un hidrógeno por el radical que contiene dos átomos de carbono y cinco de hidrógeno (fig. 3), permaneciendo el oxígeno y el otro hidrógeno.

El trabajo en la ciudad de las luces

Ya instalado en París Couper comenzó a trabajar en el estudio de la interacción de un compuesto formado de los átomos antes mencionados: pentacloruro de fósforo, con otro compuesto orgánico, ácido salicílico, con el fin de entender las

sustituciones de los átomos de cloro y fósforo –consideradas como partes negativas– por átomos de hidrógeno –considerados positivos– en las moléculas orgánicas. Esto no era tan novedoso, químicos como Chiozza, el mismo Gerhardt y su alumno Drion, Kolbe y hasta el propio Kekulé ya habían publicado estudios utilizando esas sustancias para obtener derivados de cloro y fósforo del ácido salicílico. Scott Couper logró obtener un derivado con estos elementos que los otros no habían reportado. A la sustancia que encontró la llamó terclorofosfato de salicílico. A partir de este trabajo comenzó a construir una teoría sobre cómo pensaba que estaban unidas las sustancias que él manejaba, ya que logró unir a la molécula orgánica no sólo las partes consideradas negativas sino añadirle átomos individuales y no en forma de conjuntos completos de átomos, radicales. Es casi un hecho que este trabajo le dio nuevas ideas para proponer una teoría de cómo se formaban las moléculas.

La competencia

El 16 de marzo de 1858 Kekulé mandó a los editores de la revista *Annalen* un artículo cuyo título traducido al español sería, "Sobre la constitución y la metamorfosis de los compuestos químicos y sobre la naturaleza química del carbono"; en él había dos ideas originales: la característica tetravalente (poder unirse con cuatro entidades) del átomo de carbono y la unión entre átomos de carbono.

Casi al mismo tiempo y de manera independiente Couper le dio a Würtz un artículo para que lo presentara en la Academia Francesa de Ciencias. Se titulaba "Sobre una nueva teoría química"; en él desarrollaba casi las mismas ideas que Kekulé, pero hacía énfasis en la segunda: la unión química del carbono consigo mismo, e incluso iba más allá de eso. A diferencia de la teoría dual de Berzelius, para Couper las partes negativas y positivas no eran necesarias para unir átomos y formar moléculas, no se apegaba a la teoría de los tipos de Gerhardt, y sostenía que los

radicales –conjuntos de átomos– no eran necesarios para hacer sustituciones en el átomo *base*.

Ahí fue donde la puerca torció el rabo

Aunque Würtz era muy conocido y respetado, en ese entonces no era miembro de la Academia Francesa y tenía que darle el artículo a alguien que sí lo fuera para que a su vez lo presentara ante dicha institución. Al parecer retrasó su entrega a propósito por algún tiempo y no se sabe el motivo. Tal vez no le pareció muy convincente ponerse en contra de la teoría de los tipos –él mismo había contribuido a ella– o tal vez no le interesaba o simplemente se le olvidó.

El artículo de Kekulé salió en mayo y el trabajo de Couper se presentó hasta junio y de hecho lo presentó otro investigador a nombre de Couper, Jean-Baptiste-André Dumas. En ciencia, el que publica primero casi siempre se lleva el crédito del hallazgo. Esa situación puso muy mal a Couper quien tuvo una discusión con Würtz por el retraso. Es fácil saber quién ganó, Couper regresó a Escocia a buscar un lugar donde trabajar. Allí publicó su trabajo en forma más extensa en *The Edinburgh New Philosophical Journal*.

Su aportación a la Química

En los artículos publicados Couper señala la unión entre los átomos que conforman una molécula con una recta que enlaza las letras que los simbolizan (fig. 4). Esa simple raya no es otra cosa que la intuición química en su máxima expresión. Refleja la intuición de que debe existir una interacción entre átomos que estén a cierta distancia, aunque en ese momento su naturaleza parecía bastante inexplicable. Fue entonces cuando los químicos se inventaron el concepto de enlace químico, una teoría que se desarrollaría para entender cómo se adhieren los átomos para formar moléculas. Esta manera de dibujar e imaginar cómo se encontrarían los átomos en

el espacio, facilitó en gran medida la representación y el estudio de las estructuras moleculares, e hizo más entendible por qué átomos unidos en cierto orden y con una distribución espacial definen la reactividad de las sustancias, un trabajo que han realizado los químicos desde entonces.

Hasta esa época sólo se ponían los símbolos de los elementos unos junto a otros, lo que ahora se conoce como una fórmula condensada, o a manera de lista. En todo caso se intuía qué elementos deberían estar unidos a otros directamente, pero no se tenía claro el sentido espacial que pudiera tener la representación de lo que ahora llamamos moléculas. Con la línea se empezó a concebir la estructura de las sustancias en el espacio. Esto ayudó a clarificar por qué podía haber moléculas con la misma cantidad de átomos del mismo, ya que pueden estar en distinta disposición tipo –ahora llamados isómeros–. Y también se empezaron a establecer con precisión los pesos atómicos y moleculares.

Aunque hay que aclarar que esta raya sólo es un símbolo. El enlace químico es un concepto que representa la interacción a cierta distancia entre el núcleo de un átomo, los electrones más externos del mismo átomo –enlazantes– y los núcleos y los electrones, también enlazantes de los átomos más cercanos. Sabemos ahora que estas interacciones que sí son reales, son electromagnéticas –con cargas positivas y negativas– y cuánticas, por fenómenos que le suceden a las partículas que componen a los átomos y cuya explicación sale del alcance de este escrito.

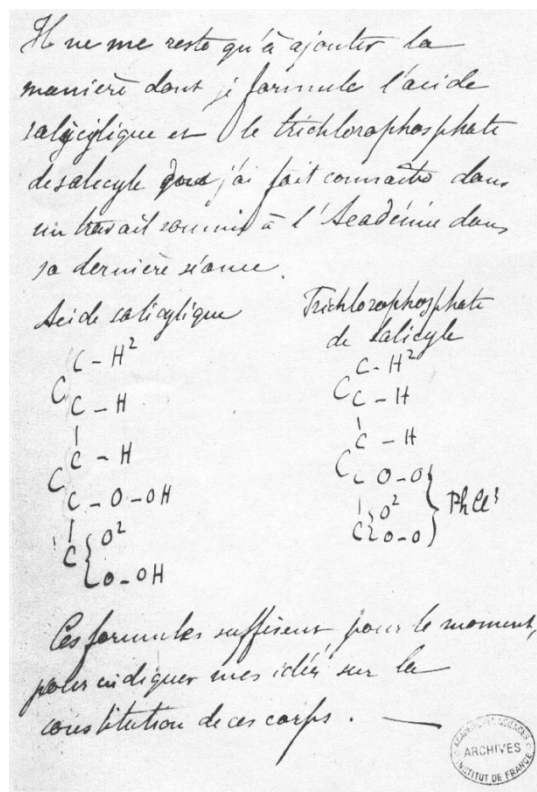


Figura 4.- Copia del manuscrito de Couper presentado en la Academia Francesa de las Ciencias. Es aquí donde por primera vez se ven unidos los símbolos de los elementos con una línea que simboliza el enlace químico.

Con base en la idea del enlace químico se pueden construir moléculas casi al gusto. Muchos químicos se dedican ahora a modelar y construir estructuras moleculares en espera de obtener ciertas propiedades y características, y lo pueden hacer con una buena computadora y *software* especializado. Con ellas pueden medir distancias, ángulos y energías del enlace químico, obtener espectros de distinta interacción energía-materia –gráficos que identifican a las sustancias– y así delinear una ruta de síntesis para pasar de una imagen en una pantalla a una sustancia sólida, líquida o gaseosa igual o similar a las que existen en la naturaleza o totalmente nueva, quiero decir de creación enteramente humana.

Un final poco feliz

A su regreso a Escocia, Couper logró ser auxiliar de un laboratorio y dar algunas conferencias en Edimburgo, pero al parecer su ánimo ya no fue el mismo. No pudo ser constante y al poco tiempo dejó el puesto. Se dice que después de alguna excursión regresó muy mal a su casa y los médicos le diagnosticaron una fuerte insolación. En las fuentes consultadas se deja entrever que probablemente cayó en una profunda depresión por no haber postulado antes que Kekulé sus ideas sobre el átomo de carbono. No se las reconocieron pero su aportación gráfica sobre el concepto de enlace es completamente suya y una enorme contribución a la química. Nunca más volvió a publicar. Vivió prácticamente 30 años en casa de su madre, al parecer, incapacitado para cualquier trabajo. Murió el 11 de marzo de 1892.

Bibliografía

- Leonard Dobbin, “The Couper quest”, *J. Chem. Educ.*, 1934, 11 (6), p 331 DOI: 10.1021/ed011p331
- Herbert C. Brown, “Foundations of the structural theory”, *J. Chem. Educ.*, 1959, 36 (3), p 104 marzo de 1959.
- <http://www.heurema.com/POFQ-Acouper.htm>
- Asimov, Isaac, *Breve historia de la química. Introducción a las ideas y conceptos de la química*, cuarta reimpresión, Ed. Alianza Editorial Madrid, 2003.