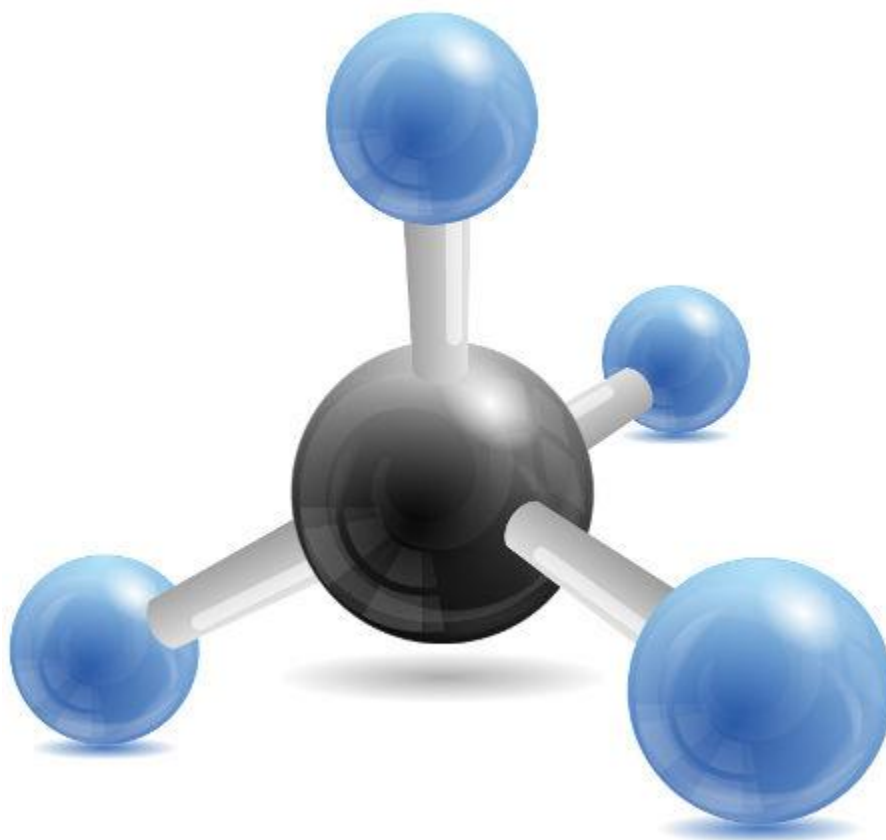




Forma tetraédrica del metano CH_4 . Imagen tomada de:
<http://brasilecola.uol.com.br/quimica/geometria-tetraedrica.htm>

La química en 3D

Iván de Jesús Arellano Palma

La estructura molecular de dos sustancias como el etanol y el éter metílico, aunque tengan el mismo número de átomos, puede indicar propiedades y comportamientos diferentes. Existen también moléculas que aunque tengan el mismo número de átomos y éstos la misma estructura o disposición tridimensional, como el ácido alfa-hidroxipropiónico, se comportan de manera distinta. Para comprender estas diferencias tenemos que entrar en el mundo de la química en 3D y de las teorías que la explican.

En busca de la estructura molecular

Las moléculas son grupos de átomos de uno o varios elementos. Los químicos investigamos la estructura molecular (disposición espacial de los átomos) para entender la forma en que las sustancias reaccionan para formar nuevas moléculas y aprovechamos este conocimiento para visualizar, diseñar y proponer otras nuevas moléculas. La investigación de la estructura molecular lleva poco más de un siglo y está llena de historias que nos permiten conocer la forma en que la ciencia en general y la química en particular avanzan mejorando, apuntalando o desechando teorías y proponiendo nuevos modelos sobre el funcionamiento de la naturaleza.

La química es una ciencia relativamente joven. Antes de integrar teorías y conceptos fundamentales de manera consistente, era un caos y ni entre los que hacían investigación se entendían ni ponían de acuerdo. En la historia de la química hay aportaciones fundamentales de grandes científicos como Kekulé, Berzelius, Dumas, Couper, Mendeleiev, Williamson, Gerhardt, Wurtz, entre otros (ver en *Cienciorama* “La raya por la que se intuyeron las moléculas”).

El alemán Kekulé y el escocés Archibald Couper propusieron de manera independiente a mediados del siglo XIX (1858), la idea de la tetravalencia en el átomo de carbono; ésta nos indica que un elemento, en este caso el carbono, puede hacer cuatro enlaces químicos, lo que le permite tener una gran capacidad combinatoria –no siempre son 4 enlaces– (ver en El carbono más promiscuo que nunca aquí en *Cienciorama*). Couper además tuvo la idea de representar el enlace químico con una raya, como se sigue haciendo hoy en día. El enlace químico es el corazón de la química ya que es el concepto responsable de las interacciones entre átomos o iones para formar moléculas. Las modernas teorías del enlace químico involucran conceptos de la física cuántica. Por otra parte, Kekulé propuso la estructura de la molécula del benceno, molécula fundamental debido a que es la base de todos los compuestos aromáticos, con gran importancia a nivel industrial por ejemplo en la síntesis de detergentes, perfumes, pinturas, etc. Con estos trabajos se

empezaron a proponer teorías que coincidían y explicaban teórica y experimentalmente las propiedades químicas y físicas de los elementos y con ellas también se pudieron predecir las propiedades de otros elementos y sustancias, prioridad de todo químico actual, debido a que la forma y estructura de las moléculas son las que determinan sus propiedades y viceversa, y hacen posible la síntesis de nuevas moléculas con otras aplicaciones.

La historia de la estructura química dio un enorme salto e impulsó el avance de otras ciencias como la física cuando en 1897 el físico J. J. Thomson descubrió el electrón, partícula subatómica con carga negativa que fue de gran utilidad para que al químico Lewis se le ocurriera que ahí estaba la clave para entender la estructura y el enlace químico. Para comprender mejor lo que se entiende por enlace químico empezaremos nuestra historia con la de este químico que se llamaba Gilbert Lewis.

¡A contar electrones!

El hallazgo y estudio del enlace químico abrió las puertas al entendimiento de la química puesto que es fundamental conocer cómo se enlazan los átomos para formar moléculas, lo que además proporciona información sobre la reactividad de las sustancias.

Lewis nació en 1875 en Massachusetts, EUA, y es considerado como uno de los químicos más influyentes de la historia. Publicó en Berkeley, California, un artículo en 1916 y después un libro en 1923 sobre las valencias y la estructura de los átomos y las moléculas, que revolucionaron la química con sus teorías sobre el enlace químico basadas en que los electrones se enlazan alrededor del núcleo de los átomos, cumpliendo en la mayoría de ocasiones el llamado octeto de Lewis, y que hoy se conocen como estructuras de Lewis. Sobre el octeto Lewis propuso una regla muy útil que nos ayuda a visualizar moléculas. Nos informa que los elementos de la tabla periódica tienen una tendencia a completar sus últimos orbitales –“espacio” donde se encuentran los electrones– con una cantidad de ocho electrones.

Aunque nunca le otorgaron el Nobel, la gran mayoría de los químicos pensamos que lo merecía, fue algo así como el Borges de la química. Las estructuras propuestas por Lewis son muy famosas y sencillas, tanto que muchos las estudiamos desde nuestros primeros acercamientos a la química y quizás por su sencillez son vigentes y se sigue trabajando con ellas.

¿Le entras al reto de armar una estructura de Lewis? No te espantes, es muy sencillo, ya lo verás. La molécula que vamos a construir es de un gas que llamamos trifloruro de nitrógeno (NF_3). En ella participan tres átomos de flúor y uno de nitrógeno, como lo indica el nombre. El NF_3 es un compuesto interesante, al que se le encuentran cada vez más aplicaciones, por ejemplo como láser químico y en la producción de pantallas de cristal líquido (ver en Cienciorama “Pantallas de cristales líquidos”). Sólo hay que seguir unos sencillos pasos para hacer la representación de la molécula. Lo primero que hay que hacer es tomar al elemento menos electronegativo, la electronegatividad se define como el gusto de atraer electrones (figura1).

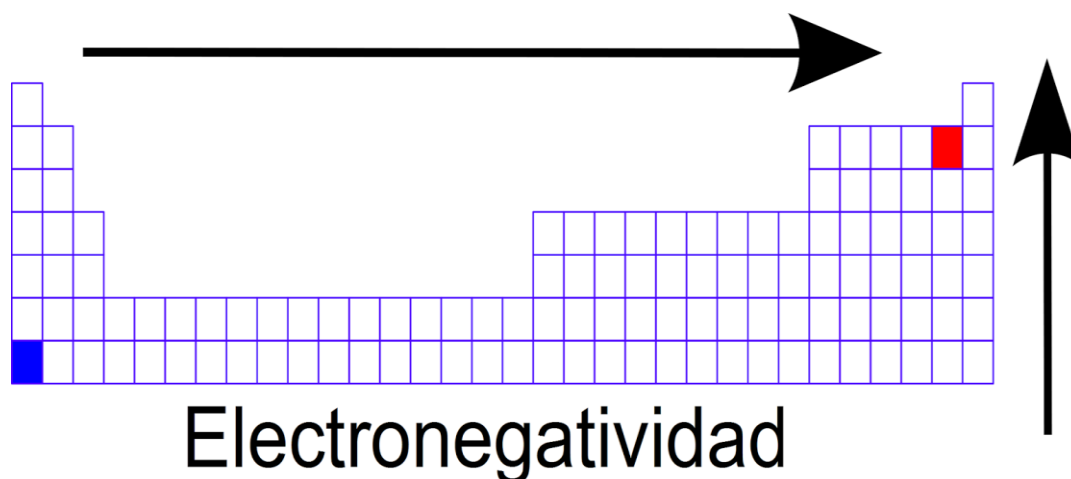


Figura 1. La tendencia a la electronegatividad crece hacia la derecha y hacia arriba. Observamos en azul marino al elemento menos electronegativo que es el francio y en rojo el más electronegativo, el flúor. Imagen tomada

de:<http://unidad1111111111.blogspot.mx/2013/06/226-electronegatividad.html>

En la tabla periódica esta propiedad también crece de abajo hacia arriba y de izquierda a derecha. Después, con tabla periódica en mano, cuenta los

electrones de valencia, es decir, los electrones que participan en el enlace químico, que en este caso son, para el nitrógeno cinco, distribuidos en las posiciones ($2s^2$, $2p^3$) y para el flúor siete ($2s^2$, $2p^5$), donde s y p representan los distintos tipos de orbitales donde se encuentran los electrones; un orbital es una región del espacio definida por la ecuación de Schrödinger. Esta forma de representar se llama configuración electrónica e indica la ubicación de los electrones alrededor del núcleo. Al sumarlos dan 26-21 electrones de valencia del flúor y 5 del nitrógeno. Posteriormente dibuja enlaces sencillos donde se comparten dos electrones entre el nitrógeno y los tres flúores y completa los octetos. Que, como ya mencionamos, nos indican que estos elementos de la tabla periódica se enlazan con una cantidad de 8 electrones para alcanzar un estado muy estable para ambos átomos y ¡listo!

En la figura 2 puedes apreciar la estructura de Lewis para el NF_3 .

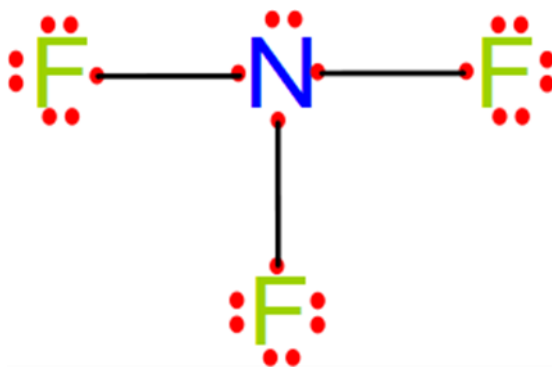


Figura 2. Estructura de Lewis para representar el trifloruro de nitrógeno. En la imagen podemos contar los 8 electrones que tiene cada átomo; se observa además que el nitrógeno, el elemento menos electronegativo, está en el centro, con algunos de sus electrones compartidos. Imagen tomada de:

https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Trifloruro_de_nitr%C3%B3geno_Lewis_2.png

Del lado derecho de la tabla periódica están colocados los gases nobles: He, Ne, Ar, etc. Éstos tienen su octeto lleno, o sea que su último orbital de llenado de electrones o de valencia está completo y eso les da una estabilidad enorme ya que en condiciones normales no reaccionan con nadie más. Para el químico y escritor Francisco Rebolledo el radón, el gas noble

al final de la tabla, es “como un venerable y casi etéreo anciano alejado por completo de los deseos mundanos, irradiando –es radiactivo– la infinita sabiduría que sólo es posible obtener en el reposo absoluto”. Muchos de los demás átomos quieren completar su octeto es decir, tener una sabiduría similar.

El modelo es sencillo y según yo hasta bonito, pero tiene sus limitaciones. Algunas de ellas son que no todas las moléculas cumplen con la regla del octeto, y que no todas las representaciones son válidas, y lo más importante para este artículo es que no es posible conocer la geometría molecular. Para conocerla veamos la teoría estrella de nuestro artículo.

La forma espacial de las moléculas o TRPECV

El nombre del modelo teórico no es fácil, es más entre los químicos ni siquiera todos sabemos qué significan sus siglas. Pero al contrario de su nombre, la teoría es sencilla y de nuevo –tal vez la veo así por mi formación académica– es incluso bonita, pues ayuda a tener una predicción de la forma en que se acomodan en el espacio los átomos de una molécula. La teoría de repulsión de pares electrónicos o de electrones de la capa de valencia o TRPECV (no es necesario memorizarlo) fue formulada y desarrollada en 1940 por el químico teórico Nevil Sidgwick y el químico Herbert Powell, ambos de la Universidad de Oxford. 18 años después la refinaron los químicos Gillespie y Nyholm del University College London. Esta teoría es muy valiosa porque tiene un buen valor de predicción, es decir, ayuda a conocer cómo será la geometría de muchas moléculas y es fácil de aplicar.

Alejaditos se ven más bonitos

Supón que regresas en el tiempo y vuelves a tus años mozos de la secundaria; es un nuevo ciclo escolar y entras a tercero. Empiezas a saludar a los amigos y hasta te prometes que este año le echarás ganas. Todo va bien hasta que entra al salón de clases el tipo que peor te cae de toda la

escuela por presumido y arrogante. Observas dónde se sienta el “chocantito” y tú te sientas lo más apartado de él. Pues los electrones que tienen los átomos que conforman cualquier molécula hacen lo mismo. Si recuerdas tus clases de física de la prepa el profesor decía: “cargas eléctricas del mismo signo se repelen, cargas de diferente signo se atraen”. Y esto es lo que pasa con los electrones de carga negativa, se repelen entre sí. La TRPECV se apoya en la idea sencilla e intuitiva de que los átomos que rodean al átomo central se van a distribuir de forma que sus repulsiones sean mínimas ya que éstas generan poca estabilidad. Entonces, cuando los electrones se distribuyen en el espacio separándose lo más que puedan –como tú del presumido–, la molécula será más estable. Vamos a buscar cómo se acomodan los átomos en las moléculas para que la repulsión sea mínima.

Los modelos ideales

¿A quién no lo han comparado con su hermano, primo o algún familiar? La comparación se da para ponerlo a uno en vergüenza y termina casi siempre con las siguientes frases lapidarias: “¿Por qué no eres como tu hermano?”, “¿por qué no puedes sacar 10 como tu primo?” Yo tengo dos hermanos mayores (un saludo a ellos) y sé muy bien de lo que hablo. Pues bien, este pasaje bochornoso en la historia de muchos lo recordé porque así de forma simplificada pero útil, funciona la teoría; es decir con moléculas que fungen de modelos ideales (figura 3).

Geometrías ideales

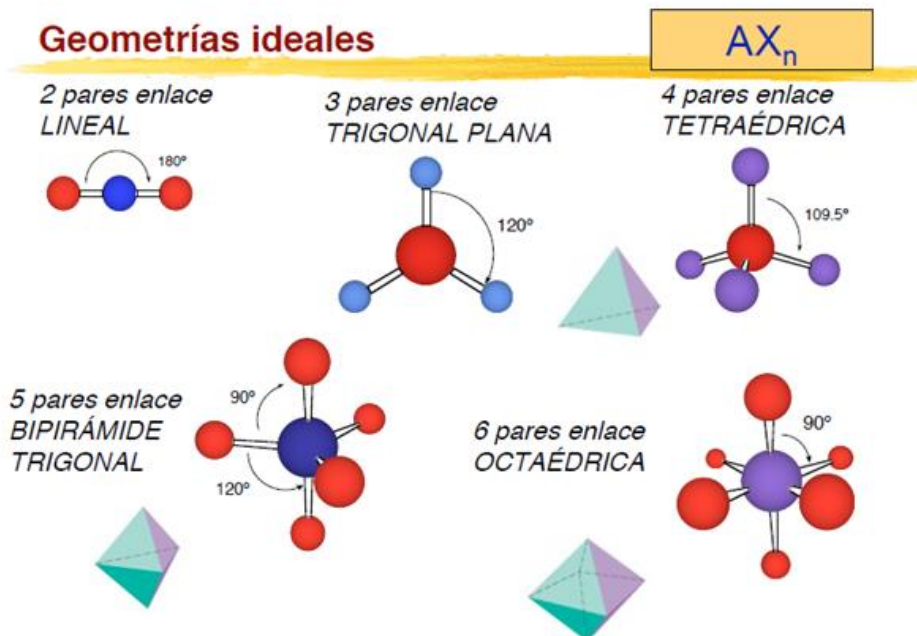


Figura 3. Geometrías ideales que utiliza la TRPECV. La forma geométrica ideal ayuda a encontrar la forma de alguna otra que busquemos. Para empezar, usemos la notación siguiente: AX_nE_m . Donde A es el átomo central (recuerda que tomamos el menos electronegativo y en el ejemplo de Lewis era nitrógeno), X los átomos periféricos o los pares enlazantes (flúor en Lewis) y E los pares libres asociados al átomo central. Si observas la imagen del inicio podrás ver que es idéntica a la tetraédrica de los modelos ideales, entonces ésta nos indica que su molécula es un tetraedro. Imagen tomada de la Universidad de Valencia:

http://www.uv.es/~borrasj/EQEM_web_page/temas/tema_5/tema_5_enlace_covalente.pdf

Viviendo en 3D

Si tienes a la mano algún fármaco o suplemento alimenticio, lee el contenido y observa que todos tienen un principio activo o molécula a la que se le atribuye la actividad del medicamento. Los principios activos tienen nombres que inician con una letra L o D seguida de un guión. Tales sustancias toman esta inicial al compararlas con una molécula quiral que es el gliceraldehído. La quiralidad es la propiedad de un objeto de no ser superponible con su imagen especular, por ejemplo tus manos: al poner una sobre otra no son simétricas (ver en *Cienciorama* “La sutil y relevante historia de la mano derecha y su siniestra hermana”) (figura 4). El gliceraldehído se usa por ser

el glúcido -azúcar- más pequeño, todos los monosacáridos se pueden obtener a partir de él, y fue el químico norteamericano Rosanoff quien propuso en 1906 que el gliceraldehído fuera el patrón para entender otros azúcares y los demás compuestos quirales de los que hay muchos en la naturaleza. Una de las dos moléculas del gliceraldehído, L -laevus en latín-, gira la luz a la izquierda, y la otra a la derecha D -dextro-. Algunos principios activos con los que te puedes encontrar en ciertos fármacos o productos alimenticios son la L-Carnitina, la D-ribosa o la L-Glutamina, entre muchas más.

El fenómeno de la quiralidad se examina desde muchas ciencias como la farmacología, la biología, la física, etc. Por ella se explica por qué dos moléculas con estructura y geometría similares muestran propiedades físicas y químicas totalmente diferentes, y ha ayudado a comprender, entre otras cosas, el origen de la vida o la función enzimática. La quiralidad nos ayuda a pensar y visualizar en tres dimensiones y esto ha ampliado el rango de las explicaciones del comportamiento químico. La quiralidad es en parte una propiedad de la asimetría en la naturaleza y esta asimetría la podemos observar no sólo a nivel molecular y genético sino incluso macroscópico, por ejemplo al nacer los bebés giran la cabeza casi siempre a la derecha -dextrógiro- y esto influye en que los enamorados giren su cabeza hacia la derecha y no a la izquierda (referencia 4).

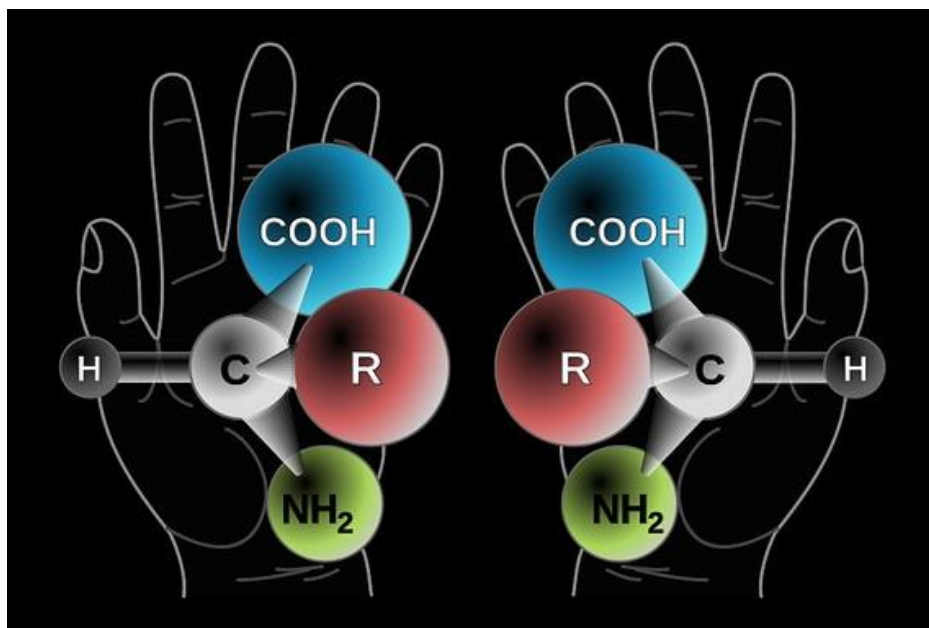


Figura 4. Quiralidad y sus dos tipos de moléculas –llamadas enantiómeros– la D o L. Los sistemas biológicos “prefieren” el enantiómero L Imagen tomada de: <http://noticiasdelaciencia.com/not/19679/nuevo-avance-para-sintetizar-moleculas-quirales-con-dos-catalizadores/>

Química la ciencia central

La química es un pilar en el desarrollo de la sociedad actual. Gracias a la demostración de la composición y la geometría de las moléculas sabemos por ejemplo qué tipo de nutrientes contienen los alimentos, es posible formular medicamentos, diseñar nuevos materiales, etcétera. Gracias a la geometría molecular, a la estereoquímica –el estudio de la química en tres dimensiones– y a las moléculas quirales, podemos entender fenómenos útiles e importantes en la farmacología, la toxicología y los sistemas biológicos. Sería difícil imaginar nuestro mundo actual sin el conocimiento molecular aportado por la química.

Por último resulta importante mencionar que aunque con las estructuras de Lewis y la TRPECV podemos entender muchas de las propiedades de las moléculas, no son las únicas teorías que nos explican el enlace químico y su disposición en el espacio. Para entender el enlace químico y su geometría de forma más precisa, los químicos utilizamos la

teoría del enlace de valencia (TEV) y el paradigma actual para entender el enlace se llama teoría de orbitales moleculares (TOM) que tendremos la oportunidad de conocer en otro artículo de tu portal *Cienciorama*.

Bibliografía

- Asimov, Isaac, *Breve historia de la química*, Alianza Editorial, España, Madrid, 2010
- De la Selva, Teresa, *De la alquimia a la química*, FCE, México, 1993, col. La ciencia para todos.
- De los Ríos, José Luis, *Químicos y química*, FCE, México, 2011, col. La ciencia para todos.
- Güntürkün, O. (2003), "Human behaviour: adult persistence of headturning asymmetry", *Nature*, 421, 711-712.
- Rosas Bravo María y González Vergara, Enrique, "Gilbert Newton Lewis", *Educación química*, 15(1), 2004.
- Rebolledo Francisco, *La ciencia nuestra de cada día*, FCE, México, 2010, col. La ciencia para todos.