



Reacción química. Existen indicadores colorímetros que hacen notar que la reacción química está sucediendo. Imagen tomada de: <http://theconversation.com/why-a-canadian-towns-water-supply-turned-pink-74315>

Todo se transforma

Iván de Jesús Arellano Palma

Resumen

¿Por qué metemos los alimentos en el refrigerador? Sin duda para retardar su velocidad de descomposición. El objeto de la química es estudiar cómo se transforma la materia. Esta transformación puede estudiarse desde varios puntos de vista, por ejemplo de la termoquímica y de la cinética química. En este artículo hablaré de la cinética química, o sea de la velocidad de una reacción, los factores que la afectan y las teorías químicas que la explican a nivel molecular.

Nada se pierde, todo se transforma

Antoine Lavoisier

La ciencia de las sustancias

Todo fluye, todo está en movimiento y nada dura eternamente, pensaba Heráclito de Éfeso, el filósofo griego, en el 540 antes de nuestra era. Y la química, de la mano del francés Antoine Lavoisier, le dio la razón. En el siglo XVIII este eminente científico se encargó de demostrarlo con una rigurosa metodología que consistía en pesar la materia antes y después de una reacción y probar con ello que la materia permanece constante. Ésta es la ley de la conservación de la materia y Lavoisier la resumió de manera elegante diciendo que “nada se pierde, todo se transforma”.

La química como ciencia llegó a la mayoría de edad cuando dejó la alquimia y empezó a poner un sustento teórico y experimental a lo que se buscaba conocer con ella: la estructura de la materia y su transformación. Considero que las teorías que explican cómo se forman los elementos de la materia son el corazón de la química y en ellas lo fundamental es la transformación de la materia. La definición más utilizada y popular de la química es que es la ciencia que estudia la materia, la energía y el cambio en ambas, pero es una verdad a medias. No obstante, para ser más precisos hay que decir que la química es la ciencia de la transformación de la materia y la energía y todo lo relacionado con ello, sobre todo los cambios de una sustancia en otra. Para conocer de qué están hechas las cosas y tener la capacidad de lograr nuevas reacciones para obtener nuevos materiales, algunos muy sorprendentes como la reacción química oscilante de Bray (ver el video mencionado en las referencias), la química cuenta con un gran cuerpo de conocimientos en constante transformación también.

Seguramente has visto en alguna película un químico con bata blanca que mezcla despreocupadamente una sustancia con otra normalmente con nombres de trabalenguas. Si bien la vida de un químico experimental es algo parecido a eso, esa escena no es tan real. El trabajo de un químico es arduo pues debe tener una gran variedad de conocimientos sobre la naturaleza eléctrica de la materia, su “gusto” por los electrones o electronegatividad, el número y la disposición de ciertos átomos en el espacio, si la interacción con el átomo o molécula vecina es fuerte o débil, y desde luego la reactividad de las sustancias. Esta última permite a los químicos saber qué compuesto es el más factible de agregar o quitar o poner más o menos para que ocurra la reacción deseada.

Todo cambia unas veces lenta y otras rápidamente

Pero la química no es la única disciplina que estudia a la naturaleza, otras también lo hacen, la biología y la física entre ellas, y su objetivo es estudiar el objeto de marras en contextos muy variados. La parte de la física que permite entender si una reacción química es posible o no –o como decimos los químicos si es espontánea o no–, es la termodinámica que unida a la química se llama termoquímica.

Para entender la velocidad de los procesos químicos hay que entrar en la cinética química que aborda la velocidad de los procesos. ¿Compraría un fármaco que te aliviara un dolor de cabeza en 24 o 48 horas? Seguramente no, pues pasado ese tiempo el dolor se habría ido naturalmente o ya habrías tomado otro fármaco que aliviara el dolor en menos tiempo. ¿Compraría un diamante si se convirtiera en grafito en corto tiempo? (figura 1). Aunque la termoquímica indica que la transformación de un diamante en grafito es posible, sucede a una velocidad demasiado lenta.



Figura 1. Aunque la termoquímica explica que el diamante tenderá a transformarse en grafito, la velocidad en que lo hace es muy lenta y no en una escala de tiempo humana. Imagen tomada de: <https://www.eharmony.co.uk/dating-advice/relationships/does-your-relationship-have-a-high-vs-low-maintenance-problem>

Doña Blanca y la química

El encuentro de dos personas es como el contacto de dos sustancias químicas: si hay alguna reacción, ambas se transforman.

Carl Gustav Jung

La teoría de colisiones apareció dos veces en este mundo por la Primera Guerra Mundial. Los científicos estaban incomunicados entre sí y era bastante difícil estar al tanto de los trabajos de los demás colegas. En 1916 el químico alemán Max Trautz publicó un trabajo donde planteaba esta teoría y dos años después el fisicoquímico inglés William Cudmore Lewis la replanteó haciendo aportes teóricos sobre la reacción química similares a los de su colega alemán. Para explicar esta teoría recordemos el juego infantil “Doña Blanca”. En él dos o más niños tienen que agarrarse de las manos para proteger a Doña Blanca, una niña, y se canta una canción que dice así: “Doña Blanca está cubierta con pilares de oro y plata. / Romperemos un pilar para ver a Doña Blanca. / ¿Quién es ese jicotillo que anda en pos de doña Blanca? / ¡Yo soy ese jicotillo que anda en pos de doña Blanca!”. Cuando termina la canción, el jicotillo –un niño– pega en los brazos de otros niños que simbolizan los pilares, para romperlos y entonces los niños se desenlazan y corren para no ser capturados por el jicotillo. Cuando el jicotillo captura a los niños o a la niña Doña Blanca, se reinicia el juego con nuevos pilares, nuevo jicotillo y nueva Doña Blanca.

Algo parecido pasa con la transformación de la materia según la teoría de colisiones. Para que exista transformación de la materia se deben romper los primeros enlaces de las moléculas que reaccionarán. Por ejemplo el H_2 reaccionará con el Cl_2 para dar dos moléculas de HCl . El primer paso para la transformación es que se rompan los enlaces químicos, llamados covalentes, que mantienen unidas las moléculas de H_2 y de Cl_2 . A este rompimiento le llamamos energía de activación y es análogo a lo que hace el jicotillo cuando con el golpe intenta romper la unión de manos de los niños (figura 2). La magnitud de la energía de activación dependerá de los elementos involucrados.

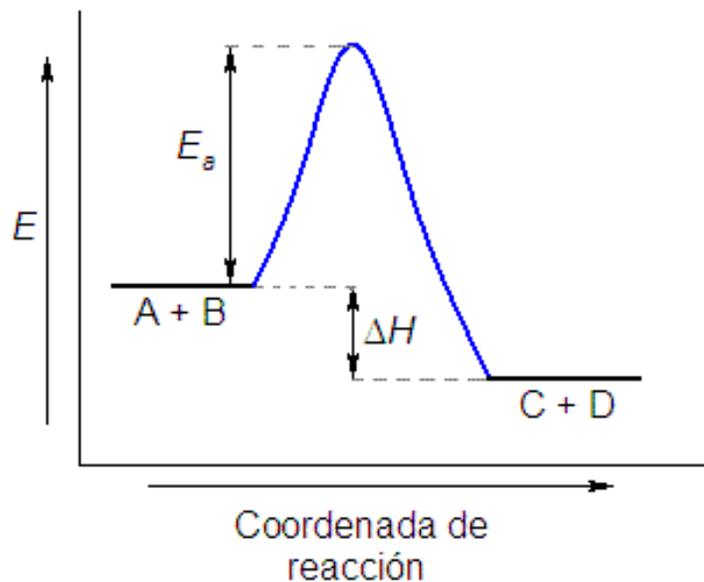


Figura 2. A esta figura los químicos la llamamos diagrama de energía o entálpico. En este caso los reactivos A+B serían H_2 y Cl_2 . La E_a es la energía de activación, y la pendiente inicial nos indicará la magnitud que se necesitará para que A+B rompan sus enlaces químicos, puedan reaccionar y continuar su transformación en C+D, los productos que en nuestro ejemplo son 2HCl. ΔH es un parámetro termoquímico que llamamos entalpía y mide los flujos de calor en la reacción. No confundir delta H con la molécula de HCl. Imagen tomada de: https://es.wikipedia.org/wiki/Coordenada_de_reacci%C3%B3n

Si la energía de activación es suficiente para romper los enlaces, entonces los átomos podrán formar nuevos enlaces. Se sabe que en una reacción química suceden aproximadamente 10^{21} colisiones por segundo, y si todas las colisiones entre los átomos recién formados fueran efectivas las reacciones químicas serían instantáneas. Pero esto no sucede así porque según la teoría no todas las colisiones son efectivas. Para entender esto observa la figura 3. Podemos pensar una colisión no eficaz como un acomodo tridimensional erróneo de los átomos que hace imposible la reacción química. En el caso de una colisión eficaz los átomos tienen una correcta orientación en el espacio que posibilita la reacción. La teoría de colisiones está asociada con la cinética química, pues una reacción con más colisiones exitosas tenderá a ser más veloz que otra con menos colisiones. Más adelante en el texto verás cómo hacen los químicos para incrementar la rapidez de una reacción.

TEORÍA DE LAS COLISIONES

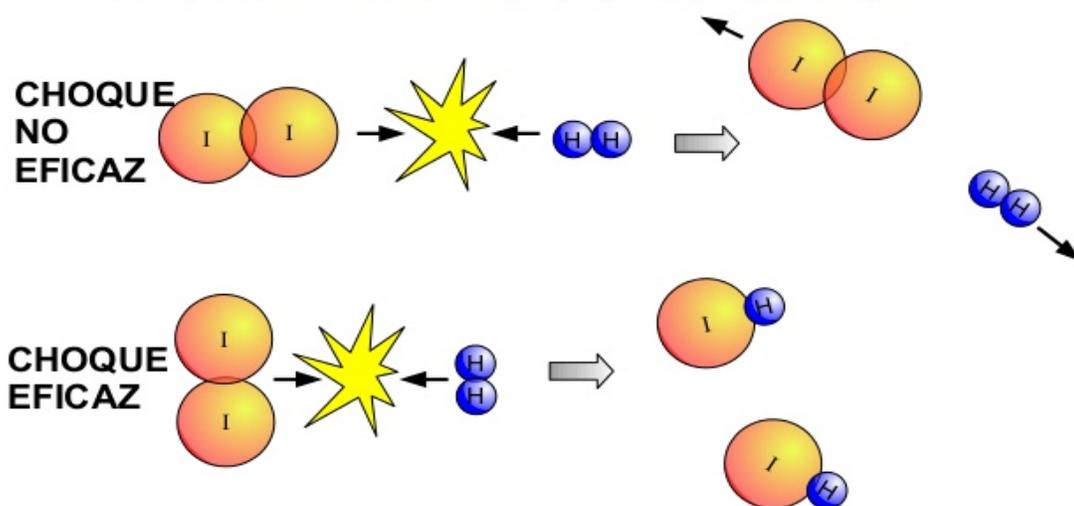


Figura 3. La segunda condición que debe cumplir una reacción para ser posible según la teoría de colisiones, es que la orientación de las moléculas sea la adecuada como se ve en la parte de abajo de la figura. Imagen tomada de: <http://redinvestigadoresquimicaupelipm.blogspot.com/p/cine.html?m=1>

La historia de una reacción

Uno de mis escritores favoritos es Ernest Hemingway. Me intrigaban sus relatos cortos porque siempre escondía un dato que hacía que el final fuera inesperado o incomprensible. Quizá el relato que más refleja lo anterior es "Los asesinos". El final de la historia no se entiende sin el dato escondido. El lector al no saberlo desde el principio lo interpreta de muchas maneras dando un sinfín de lecturas posibles al relato. Con la teoría de colisiones sucede algo similar, sabemos el inicio y el final, pero nada de lo que pasó en medio de la reacción. Éste y otros inconvenientes de la teoría los aborda otra teoría, la del estado de transición o complejo activado propuesta en 1936 por el químico teórico mexicano naturalizado estadounidense Henry Eyring. Al igual que su antecesora esta teoría postula qué características deben tener los átomos o las moléculas que van a colisionar para que la reacción proceda. Al chocar las moléculas deben formar un estado intermedio transitorio llamado estado de transición o complejo activado (figura 4). Este estado es de muy alta energía y de muy corta duración. Gracias a

esta teoría los químicos podemos proponer algo que llamamos mecanismos de reacción. Para explicar esto regresemos a la analogía con la historia de Hemingway. Podemos imaginar y suponer lo que pasó en la historia y no nos cuentan, aunque algunas suposiciones sean más creíbles que otras, pero al final podremos saber lo que realmente sucedió. Lo mismo pasa en una reacción química con el mecanismo de reacción. Este mecanismo es una hipótesis para explicar la transformación química y nos permite sugerir consecuencias y propiedades del cambio que posteriormente pueden ser validadas por el experimento y la simulación computacional.

En las décadas de 1920 y 1930 los químicos sir Christopher Ingold, Hans Meerwein y Frank C. Whitmore propusieron que el intermediario común en muchas reacciones químicas era un carbono con una carga positiva; es decir un catión -ion positivo- del carbono enlazado a otros tres átomos diferentes. Esta hipótesis ayudaba a explicar un montón de procesos orgánicos. Probablemente la rama de la química más conocida sea la química orgánica. La enorme capacidad combinatoria del carbono hace que la vida se sustente en este elemento. ¿Cómo se transforman los compuestos orgánicos? Según la propuesta de los químicos antes mencionados el carbono como catión es el intermediario de muchas o la mayoría de las reacciones orgánicas. ¿Pero cómo observar el tipo de compuestos si su vida es tan efímera? A este reto científico dedicó gran parte de su vida el químico húngaro Georg A. Olah; con sus trabajos pioneros de resonancia magnética nuclear se pudieron observar por primera vez los carbocationes, los intermediarios que así nombró Olah. Con estos trabajos dio sustento a la química orgánica moderna. Hoy en día ningún químico pone en duda la existencia de los carbocationes ya que explican y hasta predicen un sinnúmero de reacciones orgánicas y bioquímicas como la biosíntesis de colesterol y la síntesis de hidrocarburos como el octano utilizado en la gasolina. Olah y sus colaboradores también estudiaron carbocationes no clásicos $\text{-los clásicos son los ya mencionados-}$, con una carga positiva pero cada uno con cinco enlaces, y aunque en su época les llovieron duro las críticas y el escepticismo de sus colegas, por ejemplo, los de Herbert Brown Nobel de Química en 1979, hoy sabemos que la existencia de este tipo de intermediarios es posible. Este tipo de moléculas consideradas imposibles en algún momento, ahora son realidad (ver en la sección de noticias de *Cienciorama* la número 432, “El carbono más promiscuo que

nunca”, y la noticia 606: "Carbinos, 'comodines' químicos, logro catalán"). Por sus contribuciones Olah recibió el premio Nobel de Química en 1994.

Por último, en la química inorgánica no es posible tener un solo intermediario ya que al ser reacciones donde puede participar cualquier elemento de la tabla periódica, el intermediario es casi siempre único para cada reacción.

Pisando a fondo el acelerador

Ojalá y los químicos lográramos producir cualquier sustancia o material que se nos antojara. Aunque tal vez esto le quitaría emoción a la investigación y quizás hasta a la chamba. Además uno propone y la química dispone. Cuatro son los factores que pueden impedir obtener el producto deseado: la concentración de los reactivos, la temperatura, la presencia o no de un catalizador y la naturaleza y agregación de los reactivos. Algunos de estos factores son fáciles de intuir en su participación en una reacción química. Por ejemplo es sencillo intuir que a mayor temperatura mayor será la velocidad de una reacción, ya que la temperatura está directamente relacionada con la velocidad promedio de los átomos y las moléculas en un sistema. Esta intuición se ve confirmada por la ecuación de Arrhenius, una ecuación logarítmica que nos indica cómo aumenta la velocidad de una reacción al aumentar la temperatura y viceversa; claro, siempre hasta ciertos límites--. También podemos suponer que si agregamos más cantidad de reactivos -con sus excepciones- la reacción tenderá a desplazarse a los productos. Recuerda la teoría de colisiones que dice que a mayor velocidad y mayor cantidad de choques es posible que las partículas choquen más continuamente entre sí y la reacción sea posible.

“¿Quieres acelerar una reacción? Aprende de la vida”. me decía mi profesor de química. No entendía qué me quería decir. “Los químicos envidiamos a las enzimas biológicas. Son superiores en todos los aspectos a los catalizadores que utilizamos en la industria química”, concluía. Quizás la manera más efectiva que un químico utiliza para que una reacción química sea posible es usando un catalizador. Éste puede ser cualquier sustancia química o bioquímica que tenga la facultad de participar en la reacción química y que en el transcurso de la reacción no se consuma, y que haga más veloz la reacción sin mejorar el

rendimiento, ya que así sólo disminuye su umbral energético. El catalizador puede ser una enzima o catalizadores tipo ácido-base o de superficie, como los catalizadores Ziegler-Natta que se utilizan para hacer muchos productos, desde envolturas de plástico hasta vasos de yogur. A la reacción se le llama catálisis. Si observas la figura 4, verás que el mecanismo de acción de un catalizador es disminuir la energía de activación. Sin lugar a dudas el área de catálisis es una de las más estudiadas en la química, en particular la orgánica, para poder obtener las sustancias que se desean, en menor tiempo. Muchos investigadores han sido galardonados con el premio Nobel de Química en esta rama de la química. El primero de ellos fue Wilhem Ostwald por sus trabajos pioneros en catálisis -en la reacción de oxidación de amoníaco a ácido nítrico- en 1909, posteriormente en 1943 el húngaro recibió el Nobel por sus trabajos en el uso de isótopos para el estudio de las reacciones químicas, en 1967 a los químicos ingleses Ronald Norrish y George Porter por sus estudios en reacciones químicas muy rápidas causadas por la destrucción del equilibrio químico, y en 1992 el químico canadiense Rudolph Marcus lo recibió por su teoría de la transferencia de electrones en la reacción química. La capacidad de seguir reacciones químicas a nivel molecular ha sido una de las metas más deseadas por la química. Hoy en día se pueden estudiar reacciones químicas en tiempo real y en escalas de tiempo extremadamente cortas llamadas femtosegundos, que hacen posible procesos que antes se consideraban imposibles, además de entender algunos procesos biológicos como la visión. Un femtosegundo es 10^{-15} segundos. Para que el lector aprecie lo corto de la duración considere que hay tantos femtosegundos en un segundo como segundos en aproximadamente 32 millones de años. A esta rama de la cinética química se le conoce como femtoquímica (en las referencias puede ver una reacción estudiada desde la femtoquímica). Incluso este tipo de reacciones ya fueron estudiadas en detalle y al investigador egipcio Ahmed Zewail se le otorgó por ello el Nobel de Química en 1999.

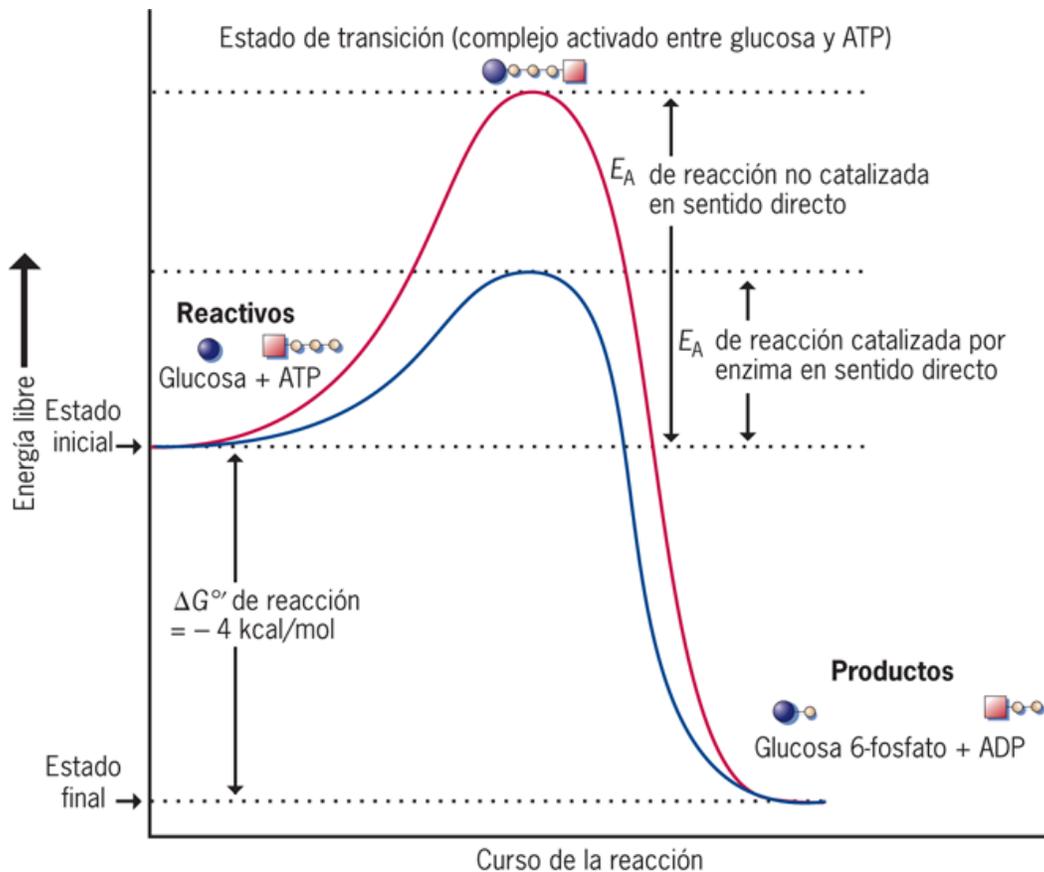


Figura 4. Imagen similar a la figura 2, pero en esta ocasión en color azul debido a la presencia de un catalizador; el umbral energético es menos pronunciado, por ende la reacción tenderá a proceder más rápido en comparación con la anaranjada. Además en la parte superior de la pendiente -cresta- vemos las moléculas que conforman el complejo activado. Imagen tomada de: <http://accessmedicina.mhmedical.com/content.aspx?bookid=2036§ionid=153035333>

La química como el dios Jano tiene dos caras

El éxito de la química como ciencia radica en que su primera cara, la científica, se transformó en técnica al llevarla al terreno industrial, su segunda cara, y se ha hecho de manera que podríamos calificar de sobresaliente ([ver en Cienciorama "La química se pone verde"](#)). La química nos permite obtener, cosméticos, tintes, conservadores, saborizantes, jabones, plásticos y con la ayuda de la biología también fármacos, fertilizantes y anticuerpos, entre el sinfín de sustancias que nos hacen más cómoda la vida.

Referencias

Divulgación

Amador Bedolla, Carlos y Costas Miguel, "Los matrimonios de la química", *Revista Digital Universitaria*, 2011, Vol. 12, No. 9

Sosa Fernández, Plinio, "Yo, químico", *¿Cómo ves?*, No. 224, julio 2017, p.30

Link para ver una reacción con la femtoquímica: <https://cuentos-cuanticos.com/2012/11/28/femtoquimica-fotografiando-las-reacciones-quimicas/>

Literatura

Hemingway, Ernest, "Los asesinos", 1927. Acá el link: <http://ciudadseva.com/texto/los-asesinos/>

Especializada

Atkins y Jones, *Principios de química. Los caminos del descubrimiento*, Editorial Panamericana, Buenos Aires, 2006

Avery H., *Cinética química y mecanismos de reacción*, Editorial Reverté, Barcelona, España, 2002

Juaristi, Eusebio, *Fisicoquímica orgánica*, El Colegio Nacional, México, 2015

Youtube

El video -en francés- sobre la reacción oscilatoria de Bray: <https://www.youtube.com/watch?v=fT0hhWIAbb4>

Los videos de Quimitube son ampliamente recomendados para entender la cinética química. Acá el link: <https://www.youtube.com/user/Quimitubes>

Recomiendo ampliamente la canción del uruguayo Jorge Drexler llamada Todo se transforma. Un homenaje a Lavoisier y a su principio. https://www.youtube.com/watch?v=TUIJT_GPNjA