

Avance y Perspectiva

Revista de divulgación del CINVESTAV

¿A qué ritmo bailan las moléculas?

AyP · Monday, March 5th, 2018

Categorías: [Ciencias Exactas](#), [Zona Abierta](#)

Richard Feynman (Premio Nobel de Física en 1965) dijo alguna vez que todo lo que hacen los seres vivos puede entenderse pensando en el movimiento de los átomos (1). Sin embargo, para la mayoría ésa no es una noción intuitiva. Al estudiar física y química, nuestros maestros nos hablaban de los estados en que se encuentra la materia y se referían a gases, líquidos y sólidos conteniendo átomos y moléculas estáticas. Sí, puede ser que nos imaginemos a las moléculas moviéndose mucho en un gas y un poco menos en un líquido cuando se menciona el movimiento de translación.

Cuando en nuestras clases de química nos presentan las fórmulas y las reacciones moleculares, tendemos a pensar en que, sin contar el movimiento traslacional, esas moléculas están más o menos estáticas, pero en realidad se están moviendo. Unas más que otras, pero todas se mueven.

Los principales movimientos que pueden presentar las moléculas; además del de translación, son el rotacional y el vibracional, cada uno de ellos están relacionados con diferentes cantidades de energía.

En un movimiento rotacional, la molécula gira en el espacio y puede que el giro sea de toda la molécula o sólo de una parte de ella. En el caso vibracional, alguna parte de la molécula se dirige hacia el frente o hacia atrás en movimientos que pueden ser concertados o no. Existe una clasificación de los movimientos de vibración: estiramiento simétrico, estiramiento asimétrico y torsión o doblado.

Los movimientos de vibración son de gran utilidad para caracterizar los tipos de moléculas. La energía necesaria para que una molécula vibre, tiene valores que se encuentran en la zona del infrarrojo del espectro electromagnético. Dependiendo del tipo de movimiento y de los átomos involucrados, la energía necesaria para que la molécula vibre es diferente. De esta manera, se puede hacer incidir radiación de infrarrojo y medir a qué valor de frecuencia se da una absorción, lo que indica si se dio un movimiento.

A partir de este valor y con base a la experiencia obtenida de analizar muchos tipos de moléculas, se pueden identificar los átomos que están involucrados en una parte de la molécula y qué tipo de movimiento presentan.

Técnicas similares se utilizan para detectar los movimientos de las moléculas utilizando otro tipo de radiación. Cada movimiento necesita diferentes valores de energía, por ejemplo, la luz absorbida puede utilizarse para correlacionarla con algún arreglo de enlace ya observado anteriormente.

Un problema de fundamental importancia cuando se busca estudiar los movimientos moleculares, es la rapidez con la que se llevan a cabo. Las técnicas de caracterización estructural de las que disponemos los químicos tienen diferentes tiempos de interacción con la molécula y por tanto diferentes tiempos de observación. Es como cuando se buscaban técnicas fotográficas para retratar objetos que se mueven a una velocidad difícil de capturar por el ojo humano.

¿Cómo puedo determinar entre qué posiciones se lleva a cabo el movimiento de una molécula? Se requiere de una técnica en que la interacción de la radiación con la molécula sea aproximadamente tan rápida como el movimiento que estoy buscando seguir. La resonancia magnética nuclear tiene un tiempo aproximado de interacción de 10^{-1} a 10^{-9} segundos y es de las técnicas más empleadas al coincidir con los tiempos de desplazamiento de muchas moléculas, la cual ha permitido “observar” el movimiento que presentan muchos compuestos cíclicos como el ciclohexano.

El movimiento electrónico es otro tipo de movimiento de gran importancia en la química, donde son los electrones de alguna parte de la molécula los que cambian de lugar. Este movimiento da lugar a cambios de color en las sustancias. Para que estos desplazamientos se lleven a cabo, precisan una excitación que se le puede inducir a las sustancias a través de varios métodos: calor o radiación de cierta frecuencia.

Así, el que las moléculas se muevan, sirve a los químicos para diferentes cosas como caracterizar el tipo de átomos presentes y la forma en que éstos están unidos unos a otros. También sirven para inducir cambios de coloración que nos señalen que algo está pasando en el ambiente en que se encuentran las moléculas de una sustancia dada, como por ejemplo que subió la temperatura o le llegó luz de ciertas características.

Sin embargo, hay movimientos moleculares que traen consigo otras consecuencias. Un re-arreglo estructural microscópico puede cambiar las propiedades de una sustancia. Por ejemplo; Meng Gao y colaboradores (2) han investigado una sal orgánica cristalina que contiene moléculas donadoras de electrones: etilendioxitetrafulvaleno con aniones hexafluorofosfato como contraiones (EDO-TTF) PF₆ (3).

A temperatura ambiente, las moléculas donadoras D en el cristal están organizadas en cadenas lineales que presentan un alto grado de simetría de inversión, es decir se pueden girar alrededor del centro y se ven iguales a como iniciaron. Esta alta simetría significa que los electrones están compartidos de manera pareja a lo largo de la cadena, lo que hace que el material tenga una alta conductividad eléctrica, parecida a la de un metal.

Sin embargo, esta sal orgánica cristalina también puede encontrarse en un estado aislante, en el que las moléculas donadoras de electrones están cargadas positivamente y derechas, o neutrales y dobladas. Esto reduce la simetría del sistema y atrapa la carga positiva (cajas rojas punteadas) en pares de moléculas adyacentes, lo que evita la conducción. Este comportamiento es parecido al de un interruptor abierto en un circuito.

Como se mencionó, cuando el sistema se encuentra en un estado de mayor simetría, las moléculas

tienen cargas iguales que se pueden deslocalizar a través del cristal (zona sombreada en rojo) favoreciendo la conducción (interruptor cerrado y alambres rojos en la representación del circuito). Gao y colaboradores (2) observaron que dos picosegundos (millonésima parte de segundo) después de que la fase aislante de la sal es excitada con un pulso láser, se forma un estado intermedio como resultado de los movimientos moleculares (flechas azules). Esta estructura intermedia contiene a su vez otras estructuras localizadas en la que los electrones se encuentran en moléculas alternas. El estado intermedio se convierte en el conductor después de 100 picosegundos, por lo que se observa que la conductividad eléctrica del material depende de la estructura del mismo.

Surge la pregunta de cómo pudieron “observar” movimientos tan rápidos. Esto ha sido posible gracias al desarrollo de técnicas espectroscópicas ultrarápidas como la difracción de rayos X con resolución en el tiempo (4). La difracción de rayos X “normal” permite la determinación de la estructura de sustancias cristalinas, pero tiene un tiempo de interacción de 10^{-18} segundos y el experimento de medición del patrón de difracción normalmente dura varias horas, por lo que la estructura que se obtiene al final del experimento es el promedio de todas las estructuras que pudieran presentarse a lo largo del tiempo (5). La técnica de difracción con resolución en el tiempo tiene lapsos de interacción del orden de femtosegundos (milbillonésima parte de un segundo) y permite la observación de movimientos ultrarápidos.

Este breve viaje por los movimientos moleculares nos permiten apreciar la importancia y utilidad de que las moléculas se encuentren en movimiento y cómo los científicos desarrollan técnicas que permiten observar tales movimientos. Sin duda, esto es útil para el desarrollo de materiales con múltiples aplicaciones.

Referencias

1. Feynman Lectures on Physics. <https://www.sciencealert.com/all-of-richard-feynmans-physics-lectures> disponibles
2. M. Gao et al Nature 496 (2013) 343-346.
3. J. E. Huheey. Inorganic Chemistry 3rd. Ed. P. 669. Harper International SI Edition 1983
4. E. Collet. Acta Crystallogr. A (2010) 66, 133-134.
5. J. P. Glusker and K. N. Trueblood. Crystal Structure Analysis: A Primer 2nd. Ed. P.194. Oxford University Press.1985.

Ver artículo completo [aquí](#).

Ma. del Jesús Rosalez Hoz

This entry was posted on Monday, March 5th, 2018 at 4:38 pm and is filed under [Ciencias Exactas, Zona Abierta](#)

You can follow any responses to this entry through the [Comments \(RSS\)](#) feed. Both comments and pings are currently closed.