



# MICROSOLVATA Y PERIODICIDAD

Una microsolvatación es una solución homogénea, cuyas propiedades son estudiadas por la química física teórica, desde sus elementos constituyentes, usando herramientas computacionales.

## Albeiro Restrepo Cossio

Químico, doctor en Química.  
Profesor de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales.  
Director del Grupo de Investigación Química-Física Teórica.  
Universidad de Antioquia.

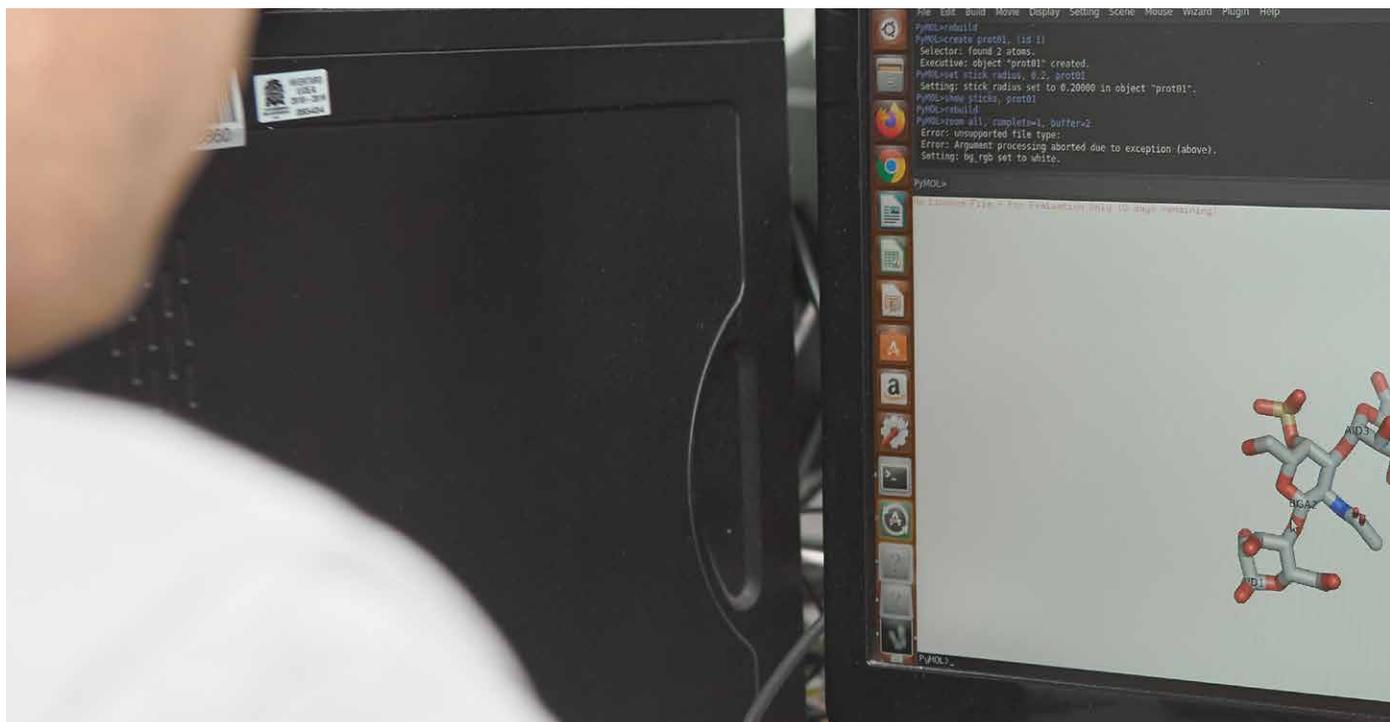


# CIÓN D

Foto | Alexander Monsalve.

**E**l café en la mañana, la sangre que lleva nutrientes y limpia las células, el aire que respiramos, las lágrimas que delatan nuestras emociones, el agua de los mares y ríos, la tinta que se adhirió en minúsculos patrones al papel en el que lees esta nota... la lista es aparentemente interminable. Hablamos aquí de un tipo de mezclas homogéneas de dos o más sustancias, a las que técnicamente nos referimos en química como soluciones. La naturaleza sería inimaginablemente diferente si sustancias tan distintas como, por ejemplo, el agua y el azúcar, no tuviesen la capacidad de, al mezclarse, de convertirse en una nueva entidad en la que no podemos reconocer sus componentes por simple inspección. La asimilación y superposición de los opuestos individuales reteniendo sus identidades, una suerte de utopía combinatoria. ¿Qué distintas serían nuestras sociedades si viviésemos bajo soluciones de ideas!

¿Qué misterios se ocultan detrás de esta asombrosa habilidad de combinarse sin dejar rastro aparente? ¿Es esta observable homogeneidad macroscópica retenida en escalas más pequeñas, específicamente en el dominio de los átomos y las moléculas que constituyen las sustancias? ¿Qué tipo de interacciones llevan a situaciones en las que, en el todo, los componentes retienen sus identidades? ¿Cuál es el efecto de estas interacciones en las propiedades de las soluciones que permiten, por ejemplo, mantener un pH constante en la sangre, necesario para que ocurran los procesos fisiológicos? Este tipo de problemas los abordamos en



el grupo de Química-Física Teórica de la Universidad de Antioquia, desde la perspectiva de la microsolvatación, es decir, desde el estudio de sistemas constituidos por unas cuantas moléculas de soluto y solvente.

Microsolvatación es un término general, aplicable a cualquier tipo de sistema que contenga más de un tipo de componentes. Celebrando el Año Internacional de la Tabla Periódica, describimos aquí algunos de los más recientes resultados de investigaciones relacionadas con la microsolvatación acuosa de cationes de metales alcalinos (grupo I) y alcalinotérreos (grupo II). Los átomos y moléculas son, por lo general, eléctricamente neutros; los cationes, por el contrario, son sistemas con exceso de carga positiva. En nuestro contexto, un catión monovalente es un átomo que ha perdido un electrón —carga negativa—, un catión divalente es un átomo que ha perdido dos electrones, y así sucesivamente.

Nuestros sujetos de estudio pueden describirse de manera general por la fórmula  $[X(H_2O)_n]^{q+}$ , donde X es el catión microsolvatado con n moléculas de agua y una carga positiva total q+. Los métodos son proporcionados por la química teórica y computacional, específicamente, aplicación de la mecánica cuántica al problema de la estructura electrónica molecular. (Una nota para quienes llevan el muy saludable escepticismo científico al extremo cuando de soluciones computacionales se trata: los Boeing 777 son una familia de aviones con excelente reputación de seguridad. Sucede que cada B777 está constituido por más de 3 millones de

**Microsolvatación es un término general, aplicable a cualquier tipo de sistema que contenga más de un tipo de componentes.**

**La capacidad de la tabla periódica de los elementos para predecir y explicar observaciones experimentales no cesa de asombrarnos.**

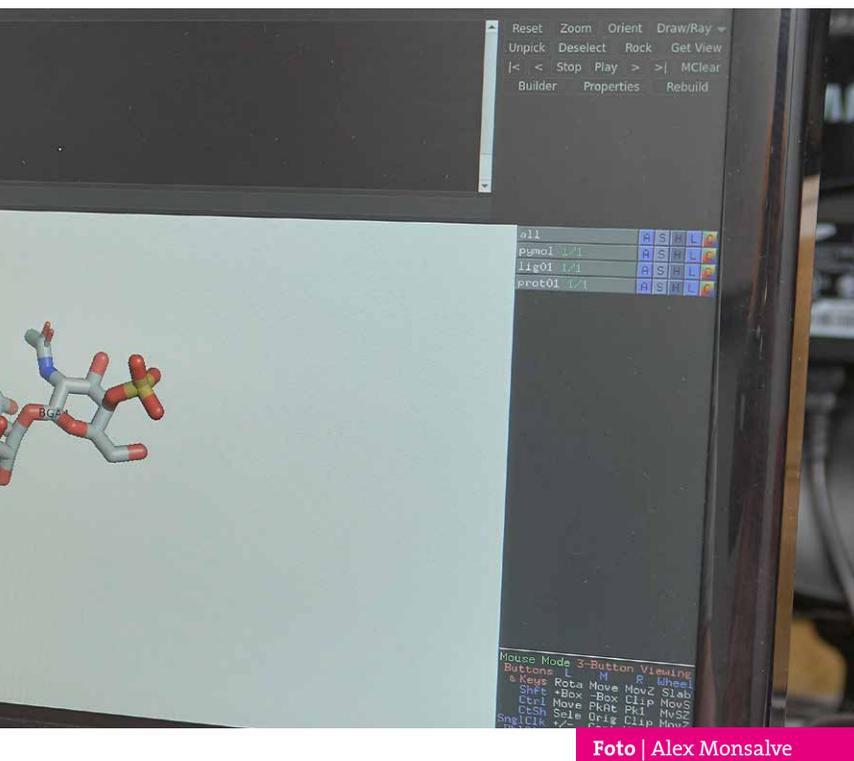


Foto | Alex Monsalve

partes, completamente diseñadas en computadores. Así que, si no confía en el trabajo computacional, no debería volar en ellos).

Los sistemas moleculares cargados son altamente inestables, al punto que, para átomos y moléculas pequeñas, solo aquellos monovalentes pueden ser observados aislados; los multivalentes necesitan de un medio que ayude a estabilizar el exceso de carga. En nuestro caso, las moléculas del solvente sirven a ese propósito. El mecanismo de estabilización es una redistribución de carga: el exceso de carga positiva se deslocaliza, redistribuyéndose hacia regiones en las moléculas de agua circundantes que tienen exceso local de carga negativa —los famosos pares libres en los átomos de oxígeno—, produciendo una interacción estabilizante. Toda historia tiene por lo menos dos interpretaciones: una explicación perfectamente equivalente, quizás más intuitiva, es que la interacción estabilizante es el resultado de la redistribución de carga negativa desde los pares libres en los átomos de oxígeno hacia el centro nuclear, que tiene exceso de carga positiva.

La tabla periódica permite establecer grupos de elementos con propiedades comunes. En nuestro caso, los elementos del grupo I existen frecuentemente como cationes monovalentes, mientras que los elementos del grupo II forman cationes divalentes. La capacidad de perder uno o dos electrones aumenta a medida que bajamos en el grupo I o II respectivamente. La carga

efectiva es la carga positiva que resulta luego de la pérdida de electrones, y se encuentra «apantallada» hacia el exterior del catión por los electrones que aún permanecen. De esta manera, en el  $\text{Li}^+$ , por ejemplo, la carga que se siente en el exterior del catión es mayor que la que se siente en el  $\text{Fr}^+$ . Como consecuencia, la carga efectiva disminuye en el grupo I para los cationes monovalentes y en el grupo II para los cationes divalentes a medida que bajamos en el grupo. La evidencia muestra que esta tendencia se cumple en el caso de la microsolvatación de cationes: (i) las energías de unión con el agua disminuyen al bajar en los grupos independientemente del número de moléculas de agua; (ii) las distancias de enlace  $\text{X} \leftrightarrow \text{agua}$  y  $\text{agua} \leftrightarrow \text{agua}$  disminuyen al bajar en los grupos (iii) la carga efectiva es tan fuerte para el  $\text{Mg}^{2+}$ , el catión divalente con menos electrones “apantallando” el núcleo, que induce disociación de las moléculas de agua cercanas.

La capacidad de la tabla periódica de los elementos para predecir y explicar observaciones experimentales no cesa de asombrarnos. Nada mal para un modelo de arreglo periódico de los elementos que fue propuesto por Mendeléyev en 1869 —no deberíamos olvidar propuestas similares, aunque no tan exitosas, como la de John Newlands en 1863—, en una época en que la mecánica cuántica no había sido postulada y en que la mecánica clásica era suficiente para explicar la evidencia experimental. La tabla periódica ha sobrevivido como herramienta útil hasta nuestro presente de la era espacial, de los computadores y de la conectividad, productos todos ellos de nuestro conocimiento de la naturaleza, que ha transformado este planeta y nuestras vidas en formas que, para aquellos que vivieron tan solo una o dos generaciones atrás, rayan con la ficción. ✘