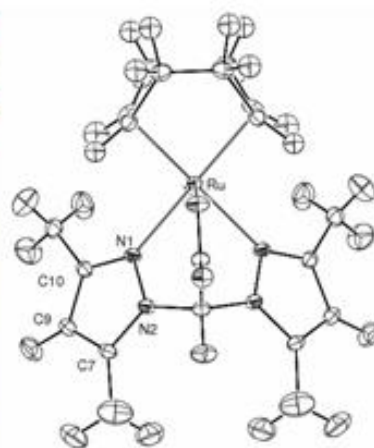
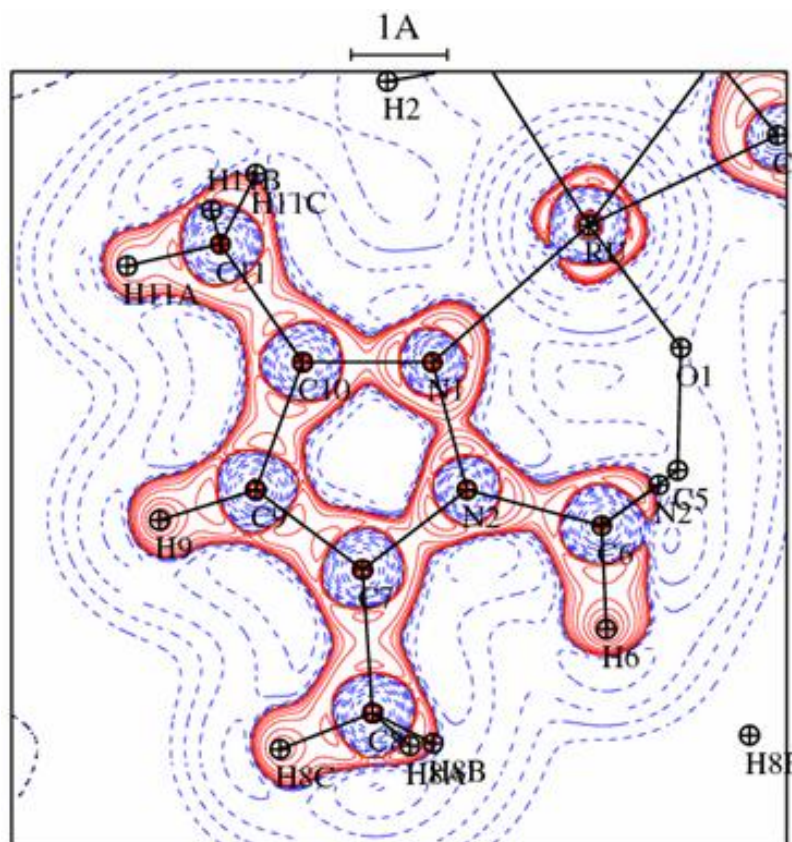


20 jun El conocimiento de los electrones determina la interacción molecular



Laplaciana de la densidad electrónica en un compuesto catalítico de rutenio (representado arriba).

¿Podemos ver los electrones? En principio no, y sin embargo sabemos que están ahí. ¿Y para qué podría interesarnos saber dónde se encuentran los electrones? Pues la verdad es que esta cuestión tiene más implicaciones de las que parece a simple vista. **El saber cómo se distribuyen los electrones, y por lo tanto la carga, en una molécula (o un**



conjunto de moléculas en un cristal) nos permite entender las características precisas de los enlaces químicos y cómo se produce la interacción entre las moléculas de cualquier tipo. Aunque el conocimiento es importante por sí mismo, su aplicación lo suele ser aún más: al entender cómo son los enlaces (uniones interatómicas a nivel molecular) podemos reflexionar sobre cómo utilizarlos o modificarlos para conseguir que las moléculas (o las agrupaciones de moléculas) tengan unas características determinadas o mejorar las propiedades que ya tienen. Por ejemplo, entender cómo está distribuida la densidad de electrones, densidad de carga, en proteínas ayuda a saber cómo interaccionan éstas con potenciales moléculas los medicamentos; es decir a comprender el reconocimiento droga-receptor.

Entender cómo se produce la ruptura y formación de las uniones en las moléculas puede permitirnos modificar una cierta reacción catalítica para que se verifique produciendo sólo aquel producto que nos interesa o gastando una menor cantidad de energía. Estos son sólo algunos ejemplos, pero el estudio de la densidad electrónica es un campo de investigación multidisciplinar que presenta claras aplicaciones en áreas tan diversas como la Química, la Física, la Ciencia de los Materiales, la Nanotecnología, la Mineralogía o la Biología.

¿Cómo podemos saber dónde están los electrones? Además de mediante el empleo de cálculos teóricos, esta información puede obtenerse experimentalmente a partir de datos de difracción de rayos X. Esta técnica es muy conocida y utilizada por numerosos grupos de investigación, ya que permite conocer directamente la estructura molecular (dónde y cómo están los átomos). En un estudio de densidades, lo que se quiere analizar no son los átomos, sino sus electrones, por lo que existen ciertas peculiaridades a nivel práctico y teórico que es preciso estudiar con profundidad.

Autores: Pilar García Orduña y Fernando J. Lahoz. Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea. Universidad de Zaragoza – Consejo Superior de Investigaciones Científicas.

Noticia relacionada: [Jaca acoge este verano “la mejor escuela mundial en el estudio de la densidad de carga”](#)

Tags: [consejo superior de investigaciones científicas](#), [csic](#), [electrones](#), [Fernando J. Lahoz](#), [Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea](#), [Pilar García Orduña](#), [universidad de zaragoza](#)

20.6.2011 | Categoría: [Ciencia en Aragón](#), [Temas](#)

Puedes suscribirte al enlace RSS para seguir sus contenidos en [RSS 2.0](#) .

« [Jaca acoge este verano “la mejor escuela mundial en el estudio de la densidad de carga” Estancia de investigación en CIRCE](#) »

