



Ciencia Ergo Sum

ISSN: 1405-0269

ciencia.ergosum@yahoo.com.mx

Universidad Autónoma del Estado de México

México

López Castañares, Rafael; Rojas Pedral, Mercedes; Olea Cardoso, Óscar
La química cuántica y el premio Nobel 1998
Ciencia Ergo Sum, vol. 6, núm. 2, julio, 1999
Universidad Autónoma del Estado de México
Toluca, México

Disponible en: <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=10401515>

- [Cómo citar el artículo](#)
- [Número completo](#)
- [Más información del artículo](#)
- [Página de la revista en redalyc.org](#)

 redalyc.org

Sistema de Información Científica

Red de Revistas Científicas de América Latina, el Caribe, España y Portugal

Proyecto académico sin fines de lucro, desarrollado bajo la iniciativa de acceso abierto



LA QUÍMICA CUÁNTICA Y EL PREMIO NOBEL 1998

RAFAEL LÓPEZ CASTAÑARES, MERCEDES ROJAS PEDRAL Y ÓSCAR OLEA CARDOSO*

Recepción: 19 de enero de 1999

Aceptación: 03 de mayo de 1999

Existe algo en el hombre que lo estimula a saber. Contempla el mundo y se pregunta: ¿De qué está formado?, ¿por qué existe?, ¿cómo funciona? Si consideramos la gran complejidad de nuestro entorno, apreciaremos mejor la hazaña que la imaginación requiere para entender nuestra realidad. En particular, la inquietud acerca de cómo se articula el mundo material ha ocupado durante largo tiempo el pensamiento de muchos hombres y mujeres de ciencia.

Las teorías científicas nos permiten acercarnos a la realidad. Cuando nuestro conocimiento aumenta, mejora la visión entre la teoría y el mundo objetivo. De acuerdo con esta

perspectiva, las verdaderas leyes de la naturaleza se fundamentan en datos experimentales de nuestras apreciaciones, obtenidas gracias a perseverantes investigaciones. Por tanto, no es conveniente pronunciarse sobre si una teoría en lo particular es verdadera o es falsa; sólo podemos decir si es más o menos útil. Una teoría es provechosa si su esquema descriptivo relaciona con alta precisión una amplia gama de fenómenos físicos.

La teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica ayuda a explicar el enigmático comportamiento del mundo microscópico, cuyas partículas elementales (núcleos, átomos e incluso moléculas) se muestran en franca relación contra-intuitiva con los conceptos clásicos del movimiento. Analicemos un ejemplo.

Se sabe que los procesos como la radioactividad son aleatorios e imprevisibles, si bien los grandes grupos de átomos radioactivos obedecen las le-

yes de la estadística, no se puede predecir el instante preciso de la desintegración de un núcleo atómico individual. Esta incertidumbre fundamental se extiende a todos los fenómenos atómicos y subatómicos.

Una partícula como el electrón o cualquier otra, no parece seguir en absoluto ninguna trayectoria definida en su permanente movimiento. No se pueden precisar las rutas de los electrones ni de las otras partículas conocidas.

A la mayoría no nos preocupa la realidad concreta del mundo exterior, después de todo, lo que nos rodea está formado en su totalidad por todos los átomos existentes en la tabla periódica de los elementos químicos. Pero, ¿cómo pueden combinarse grandes cantidades de átomos para formar algo sólido y real?, ¿qué característica especial del ser humano le confiere el poder de concentrar unos átomos en una estructura real existen-

* Facultad de Química y Coordinación General de Investigación y Estudios Avanzados, Universidad Autónoma del Estado de México.

Correo electrónico: rlc@coatepec.uaemex.mx

Agradecemos de manera cumplida a nuestros revisores anónimos por sus comentarios, que sin duda contribuyeron a mejorar el trabajo.

te? La mecánica cuántica es una de las disciplinas más técnicas y difíciles de entender. Los comentarios aquí mencionados pretenden proporcionar a nuestros lectores una visión muy resumida y general de los extraños conceptos y razonamientos que maneja esta útil disciplina, la mecánica cuántica (Segré, 1983).

La mecánica cuántica es ante todo, una rama de la física, con conceptos de fuerte actualidad que han permitido cosechar éxitos brillantes. Nos ha proporcionado el láser, el microscopio electrónico, el transistor, los superconductores y la energía nuclear. De manera directa, explicó el enlace químico, la estructura del átomo y del núcleo atómico, la conducción de la electricidad, las propiedades térmicas y mecánicas de los sólidos, los mecanismos que tienen lugar en el interior de las estrellas y una gran variedad de otros fenómenos fisicoquímicos importantes. La teoría ha penetrado en casi todas las áreas de investigación científica. Actualmente se aplica de manera rutinaria en muchos campos de la ingeniería. En resumen, la mecánica cuántica es una teoría con múltiples aplicaciones prácticas y ampliamente contrastada. Por un lado, gran cantidad de aparatos de uso corriente se basan en sus principios; por otro, gran número de delicados y precisos experimentos científicos la confirman.

Las leyes de la mecánica cuántica, como han sido formuladas, permiten comprender teóricamente y calcular cómo los electrones y el núcleo atómico de todos los elementos químicos interactúan para permitir la construcción y formación de toda la materia que existe en el universo en todas y cada una de sus manifestaciones. La tarea de la química cuántica es explotar este conocimiento de la mecánica cuántica para aplicarlo

en la descripción de los sistemas moleculares.

El crecimiento de la mecánica cuántica dentro de la física, a principios de 1900, abrió nuevas posibilidades, pero las aplicaciones en la química tardaron en llegar. Fue prácticamente imposible manejar las complicadas relaciones matemáticas de la mecánica cuántica para sistemas tan complejos como resultan ser las moléculas (química cuántica) que forman prácticamente todo lo que podemos apreciar a nuestro alrededor.

El punto inicial básico para cualquier sistema multielectrónico es la ecuación de Schrödinger. Sabemos que ésta no se puede solucionar en forma exacta para átomos que poseen más de un electrón en su configuración, por lo tanto, es necesario utilizar métodos de aproximaciones sucesivas para lograr cualquier avance significativo. El método que más se acerca y uno de los más importantes para resolver la ecuación de Schrödinger para sistemas de más de un electrón, es el método de Hartree-Fock. Este método fue desarrollado en los años treinta por el físico británico Douglas Rayner Hartree (1897-1958), el físico ruso Vladimir Alexandrovitch Fock (nacido en 1898) y por el físico estadounidense John Clark Slater (1900-1976). El modelo asume que cada electrón se mueve en función de un campo potencial central creado por el núcleo y el campo promedio producido por el resto de los electrones. Este procedimiento se puede aplicar a todos los electrones y, con base en las funciones de onda obtenidas de esta manera, la función de onda total se entiende como el producto de las funciones de onda de los electrones individuales.

El método es iterativo, es decir, se eligen funciones de prueba que minimizan el funcional de energía, y se

repite hasta que ya no se observan cambios en las distribuciones electrónicas individuales o en sus campos de energía potencial. Las densidades electrónicas calculadas por este método concuerdan bien con resultados experimentales en difracción de rayos X y en difracción electrónica.

Un cálculo por este método para un átomo polieletrónico es una tarea abrumadora. Douglas Hartree llevó a cabo varios cálculos en 1930, cuando todavía no existían las grandes computadoras electrónicas con que se cuenta hoy en día. Por suerte, el padre de Hartree, ya jubilado, se entretenía realizando los cálculos numéricos de su hijo. Actualmente, las nuevas computadoras han reemplazado la valiosa ayuda del padre de Hartree (Ira, 1974 y Frank, 1968).

Las aplicaciones concretas iniciaron a principios de los sesenta, cuando las computadoras pudieron apoyar de manera decidida en la solución de las complicadas ecuaciones de la mecánica cuántica, es decir, en la solución de problemas asociados con la química cuántica, lo que ha permitido que emerja una nueva rama de la química. En la década de los noventa se ha presentado un enorme desarrollo teórico y computacional, que ha revolucionado la totalidad de la química. Los científicos Walter Kohn y John Pople son las dos figuras más prominentes en este proceso. El trabajo teórico de Kohn generó las bases para simplificar las matemáticas en descripciones de los enlaces de los átomos, un requisito previo para muchos de los cálculos de la actualidad. J. Pople desarrolló la metodología completa de la química cuántica actualmente utilizada en varias disciplinas científicas.

Los cálculos basados en la computadora son ahora de uso generalizado para complementar técnicas experi-

mentales. Por varias décadas se han desarrollado y refinado, así que hoy en día es posible analizar la estructura y las propiedades de la materia en detalle. El cálculo convencional de las propiedades de las moléculas se basa en la descripción del movimiento de los electrones. Los desarrollos científicos mencionados avalan el reconocimiento a los galardonados en esta ocasión con el premio Nobel.

I. Los galardonados

En un breve mensaje que a la letra dice: “La Real Academia Sueca de Ciencias ha otorgado el premio Nobel de Química versión 1998 en el área de Química Cuántica a los investigadores:

Walter Kohn, de la Universidad de California, Santa Bárbara, Estados Unidos, y a

John A. Pople, de la Universidad Northwestern, Evanston Illinois, Estados Unidos, de nacionalidad británica.

Los laureados han llevado a cabo contribuciones pioneras en el desarrollo de métodos que pueden utilizarse para estudios teóricos de las propiedades de las moléculas y los procesos químicos involucrados. Los investigadores han tratado de establecer metodologías para comprender cómo funcionan los enlaces de los átomos en las moléculas. Con ellas ha sido posible calcular las propiedades de las moléculas y sus interacciones.

No obstante sus contribuciones por separado a la ciencia internacional, de acuerdo con el criterio de la Academia Sueca, Kohn y Pople fueron las dos más prominentes figuras en el enorme desarrollo teórico y computacional, puesto que proporcionaron un fuerte impulso al avance de la química cuántica. Estos investigadores han seguido muy dife-

rentes caminos, aunque su denominador común es el mutuo interés por los sistemas con muchos electrones (multielectrónicos)” (Royal Swedish Academy of Sciences, 1998).

Walter Kohn

Kohn nació en Viena, Austria, en 1923. Después de la Segunda Guerra Mundial obtuvo el grado de master en matemáticas aplicadas en la Universidad de Toronto, en 1946. Se doctoró en física con Julian Schwinger en la Universidad de Harvard, en 1948, donde permaneció por dos años como instructor. De 1950 a 1960 Kohn fue profesor de física en el Instituto de Tecnología en Carnegie, y de 1960 a 1979 en la Universidad de California, en San Diego. En 1979 se convirtió en el primer director del recién creado Instituto de Física Teórica de la Universidad de California en Santa Bárbara, cargo en el que duró cinco años. En 1984 ingresó como catedrático de física en la UCSB, donde actualmente continúa como profesor-investigador activo (Goss Levi, 1998).

Walter Kohn, físico teórico, en un principio se enfocó a estudiar sistemas de la materia condensada. Su teoría de la densidad funcional ha sido el método elegido por los físicos de estado sólido interesados en la estructura electrónica. Mostró, en 1964, que la energía total para un sistema descrito por las leyes de la mecánica cuántica se puede calcular teóricamente si la distribución espacial de los electrones (densidad electrónica) se conoce, para lo cual no es necesario considerar el movimiento de cada electrón individual, sino que es suficiente si se sabe el número promedio de electrones localizados en cualquier punto del espacio, lo que

ha permitido desarrollar un método computacional más simple, denominado *teoría de la densidad funcional*. La simplicidad del método hace posible efectuar el estudio de moléculas de grandes pesos. En nuestros días, por ejemplo, los cálculos se pueden aplicar para explicar cómo suceden las complejas reacciones enzimáticas en todos los organismos vivos.

Muchos investigadores, por varias décadas, han contribuido a mejorar la ecuación para determinar la energía con la cual quedan suficientemente descritos los estudios a gran escala de sistemas moleculares. Esto se ha llevado a cabo, parcialmente, mediante la adaptación de un pequeño número de variables sobre datos experimentales. El método Kohn introducido se conoce como teoría de la densidad funcional y actualmente se utiliza en estudios de numerosos problemas en áreas de la química, desde calcular la estructura geométrica de las moléculas (ángulos y longitudes de enlace) o para seguir la cinética de las reacciones químicas.

John A. Pople

Pople nació en Burham-on-Sea, Somerset, Reino Unido, en 1925. Se doctoró en matemáticas en la Universidad de Cambridge en 1951, bajo la dirección de John Lennard-Jones. Pople permaneció en Cambridge como investigador hasta 1958, lo que le permitió realizar estudios semiempíricos de moléculas. En 1964, después de seis años como superintendente de la División de Física Básica del Laboratorio Nacional de Física en Teddington, Inglaterra, Pople se trasladó al Tecnológico de Carnegie como profesor de fisicoquímica. En 1974 se convirtió en catedrático de ciencias naturales en la Universidad John Christian Warner. Finalmente, se integró a la Universidad de

Northwestern desde 1986, donde continúa trabajando sobre estructura molecular (*ibid.*).

Pople, entrenado como matemático, se ha concentrado en la estructura electrónica de las moléculas. A mediados de los sesenta, el científico y sus estudiantes, con gran innovación y esfuerzo, iniciaron la creación continua de programas computacionales basados en la aproximación Hartree-Fock, que permite facilitar el complejo cálculo de estructuras moleculares. Para principios de los años noventa, la mayoría de estos programas ya habían sido incorporados a las aproximaciones de densidad funcional. Cerca de la mitad de los cálculos de estructura electrónica en química hoy en día se efectúan a través de este procedimiento.

John Pople fue galardonado por el desarrollo de los métodos computacionales que hacen posible el estudio teórico de las moléculas, sus propiedades y cómo interaccionan en las reacciones químicas. Estos métodos se basan en las leyes fundamentales de la mecánica cuántica, como la definió, entre otros, el físico Schrödinger. Una computadora se alimenta con las características de una molécula o de una reacción química y los resultados que se obtienen son una descripción de las propiedades de aquella molécula o de la manera como se verifica una reacción química.

Durante los sesenta, muchos grupos de investigadores en Europa y en los Estados Unidos empezaron a explotar el gran potencial de la computadora, nuevos métodos de computación fueron desarrollados y refinados. John Pople se convirtió en una figura líder en este campo, pues desarrolló métodos teóricos que ganaron gran significado en el conocimiento de cómo ocurren las reacciones químicas, lo que al mismo tiempo

permitió que su técnica computacional fuera fácilmente accesible a los investigadores, a partir de que diseñó el programa de cómputo GAUSSIAN-70. La primera versión de éste fue publicado en 1970. El programa muy pronto fue ampliamente utilizado por investigadores de todo el mundo y se ha desarrollado desde entonces, de modo que ahora lo utilizan cientos de químicos en universidades y compañías comerciales de todo el mundo. Durante los setenta y los ochenta Pople continuó refinando la metodología, al mismo tiempo que elaboraba un bien documentado modelo químico. Así que él fue capaz de iniciar en los noventa la teoría de la densidad funcional de Kohn, lo que significó la apertura de nuevas posibilidades para analizar moléculas más complejas.

II. Teoría de la densidad funcional

En 1964 Kohn y Pierre Hohenberg visitaron la Escuela Normal de París, y juntos formularon un teorema de partida: que el efecto de un potencial externo (tal como el potencial nuclear) sobre la energía del estado base de un sistema de electrones interactuante se puede expresar completamente en términos de una densidad electrónica (Hohenberg y Kohn, 1964). En principio, se puede obtener toda la información electrónica de esta única función, no se necesita preocuparse acerca de la función de onda completa de muchos cuerpos, lo que implica una gran simplificación. Además, la densidad electrónica se puede encontrar utilizando un principio variacional, apoyándonos en la existencia de un funcional de densidad (una función de una o varias funciones) cuyo mínimo es la energía exacta del estado basal.

Años antes, Llewellyn Thomas y

Enrico Fermi desarrollaron una idea similar de representar el problema atómico en términos de densidades electrónicas. El trabajo de Kohn y de Hohenberg colocó este modelo inicial sobre un ajuste más riguroso.

Cuando Kohn regresó a su laboratorio, el cual en ese momento se encontraba en la Universidad de California, en San Diego, comprometió a su estudiante de posdoctorado Lu Sham en el mismo problema, juntos intentaron sacar adelante un esquema computacional, conocido como las ecuaciones de Kohn-Sham para resolver el problema formulado en términos de densidades de funcionalidad (Kohn y Sham, 1965). En el proceso mostraron que la densidad funcional aproximada es equivalente al procedimiento Hartree, pero con un inesperado mejoramiento. El intercambio electrónico y la correlación de interacciones, que son ignoradas por Hartree, se incluyen en las ecuaciones de Kohn-Sham como algo adicional al potencial aditivo en las ecuaciones de Schrödinger de partícula simple.

Estos dos trabajos de Kohn, uno con Hohenberg y el otro con Sham, condujeron hacia una nueva dirección (Hohenberg, Kohn y Sham, 1990). Sin embargo, si nos enfocamos en la densidad electrónica, la aproximación por densidad funcional ha tenido un impacto profundo en la manera en que las personas piensan acerca de los problemas físicos y químicos, lo cual ha conducido no sólo a simplificaciones computacionales, sino también a la profundización conceptual.

Así que tal visión o profundización conceptual fue la aproximación de densidad local introducida por Kohn y Sham, acorde con la cual las correlaciones e interacciones de intercambio son tratadas como si la densidad



fuera constante dentro de cada pequeña región local. Esta aproximación ha sido muy útil para físicos de materia condensada a lo largo de treinta años, lo que ha jugado un gran papel, por ejemplo, en la determinación energética de las estructuras cristalinas de diferentes fases de sólidos. En los ochenta, Michele Parrinello (Max Plack Institute for Solid-State Research in Stuttgart) y Robert Car (University of Geneva) realizaron una extensión adicional a la visión de la teoría utilizada para ejecutar cálculos de dinámica molecular *ab-initio*. Hoy en día la aproximación se utiliza para evaluar propiedades estáticas, dinámicas y termodinámicas no sólo de cristales sino de otras muchas clases de materiales, tales como sólidos amorfos, líquidos y biomoléculas.

Kohn, por sí mismo ha desempeñado un importante rol al extender la teoría de la densidad funcional, lo que ha contribuido en su aplicación a superficies en trabajos realizados en los setenta y al desarrollo del análisis de la densidad funcional dependiente del tiempo. Los colegas de Kohn en materia condensada puntualizaron los muchos efectos que iluminan su nombre, como la anomalía Kohn, que es un pliegue en la relación de dispersión del fonón, el método de Kohn-Korringa-Rostoker para cálculos de estructura de bandas y el esquema de Luttinger-Kohn de estados de impurezas en semiconductores.

III. Densidad funcional en química

Los programas de cómputo como los de Pople, no incorporaron la aproximación de la densidad funcional sino hasta principios de los noventa; no obstante que algunos investigadores ya antes los habían integrado a sus aproximaciones en tratamientos

moleculares y cúmulos. W. Parr (University of North Carolina) (Parr y Yang, 1989), fue uno de los pocos químicos que tuvo un interés inicial en la teoría de la densidad funcional, y Kohn lo acreditó a usarla para ganar visión conceptual y también para extender esta técnica al campo conceptual de los químicos, a través de un libro que él escribió. Parr nos dice que la teoría de la densidad funcional no fue atractiva para un gran número de químicos hasta que su precisión se incrementó, entonces fue incorporada a programas de cómputo accesibles. Los químicos demandan un alto nivel de precisión debido a las muy pequeñas diferencias en energía necesarias para entender los fenómenos que estudian. Para obtener la precisión deseada en la teoría de la densidad funcional se requiere un tratamiento más sofisticado de correlaciones electrón-electrón que se emplean en la aproximación de densidad local.

Comúnmente, la precisión de la aproximación de la densidad funcional varía con la aplicación. Kohn sospecha que esta aproximación, por su naturaleza, nunca puede ser una teoría que permita obtener gran precisión, su única ventaja es la posibilidad que brinda para tratar con moléculas grandes, sobre lo cual existe un creciente interés. En contraste, los cálculos de Hartree-Fock u otros más convencionales llegan a ser mucho más difíciles conforme se incrementa el número de electrones en el problema.

IV. La promesa de las computadoras

Durante los años cincuenta y sesenta Pople realizó estudios teóricos de

moléculas con muchos electrones, especialmente hidrocarburos, en donde se puede reducir esencialmente el problema a sólo un electrón por átomo. En 1952, formuló un modelo similar al modelo Hubbard extendido en física del estado sólido, donde se destacaban las interacciones de los electrones tanto con los vecinos más próximos como con los siguientes más cercanos. Éste se conoce como Modelo PPP, nominado por las siglas de Pople, y por el equipo de Robert Parr y Rudolph Pariser, quienes lo desarrollaron de manera independiente (Krieger, 1997).

Cuando las potentes computadoras entraron en escena, Pople fue de los primeros en probar su potencial permitiendo predicciones útiles de propiedades moleculares. Pople apreciaba, en principio, el valor de las microcomputadoras (semejantes a las estaciones de trabajo de hoy) como el invento principal alcanzado en los sesenta. De hecho, Pople compró la tercer microcomputadora hecha por la *Digital Equipment Corporation*. Pople admitió lo sorprendido que estaba por la forma tan rápida en que las computadoras analizaban complejos cálculos, permitiendo que él y sus colegas fueran encontrando formas eficientes de usarlas.

Otra de las contribuciones de Pople fue la computación en línea de las muchas integrales (del orden de 10^6 a 10^9) involucradas en la solución de las ecuaciones de Hartree-Fock. En opinión del comité Nobel, las técnicas de integración de Pople reducen los costos de computación del orden de 10 a 100.

Pero en los setenta, los químicos fueron requiriendo mayor precisión que el 1% proporcionado por la aproximación de Hartree-Fock, de manera que pudieran determinar energías relativas tales como las de enlace o los

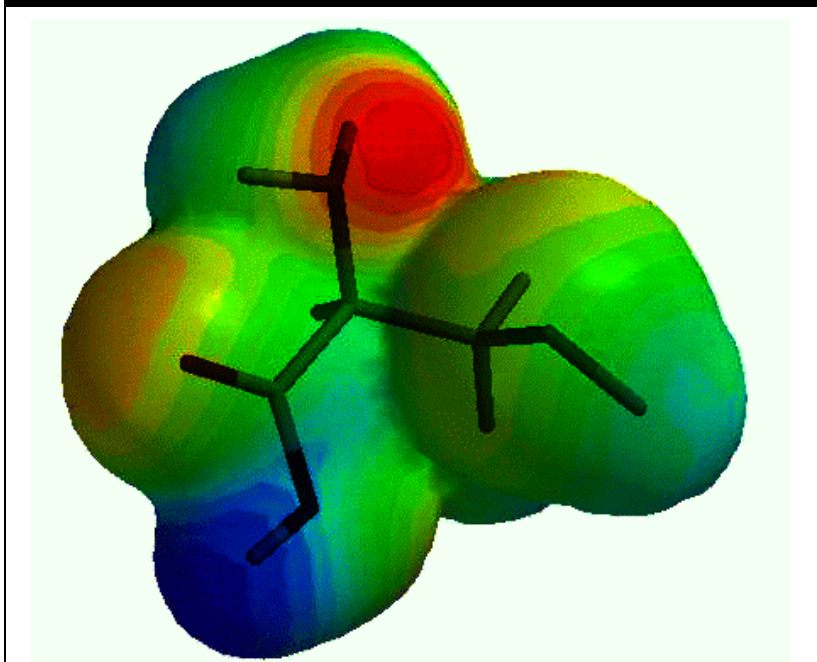
calores de reacción. Para incorporar los efectos detallados adicionales que se requerían de las correlaciones electrón-electrón –las cuales eran tratadas de manera promediada en la aceptación Hartree-Fock de movimiento independiente de los electrones–, Pople y sus estudiantes desarrollaron una serie de expansiones de perturbación (arriba del cuarto orden). Con la expansión del cuarto orden, es posible obtener una precisión de aproximadamente 0.1%, bastante aceptable para los cálculos químicos.

Junto con sus alumnos, Pople diseñó un programa computacional denominado GAUSSIAN, el cual proporcionó la eficiencia y precisión de los cálculos y diseñaron lo que ahora se conoce como interfase de uso amigable. Si bien inicialmente Pople repartió su programa gratuitamente, más tarde fundó una compañía llamada GAUSSIAN para distribuirlo comercialmente. Actualmente, una cantidad de firmas ofertan varios tipos de programas para química computacional, cuatro liderados por estudiantes formados por Pople. Tales programas no sólo son usados por físicos y químicos, sino además por geólogos, astrónomos, investigadores biomédicos, científicos en materiales y biólogos (Wilson, 1996).

V. Aplicaciones de la química cuántica

La química cuántica se utiliza actualmente en todas las ramas de la química y física molecular. Esta área del conocimiento produce información cuantitativa acerca de las moléculas y sus interacciones. La teoría desarrollada por los esfuerzos de los galardonados con el premio Nobel nos ha dejado comprender de manera profunda los procesos moleculares de sistemas complejos que no se pueden

FIGURA 1. REPRESENTACIÓN ESQUEMÁTICA DEL DIAGRAMA DE DENSIDAD ELECTRÓNICA DEL AMINOÁCIDO CISTEÍNA OBTENIDO MEDIANTE EL CÁLCULO POR UN PROGRAMA COMPUTACIONAL DE QUÍMICA CUÁNTICA. LA ESTRUCTURA MUESTRA LAS SUPERFICIES DONDE LA DENSIDAD ELECTRÓNICA ES DE 0.002 ELECTRONES POR ARMSTRONG CÚBICO (ELECTRONES/Å³), QUE NOS INDICA QUE TODOS LOS ELECTRONES PRÓXIMOS SE LOCALIZAN EN EL INTERIOR DE LA SUPERFICIE. LA INTENSIDAD DE LA COLORACIÓN (ZONA OSCURA) INDICA EL POTENCIAL ELECTROESTÁTICO EN LA SUPERFICIE.



obtener de experimentos sencillos.

La combinación de la teoría y la experimentación hoy en día permite a los investigadores entender la estructura íntima de la materia. Pero entonces, cómo se llevan a cabo los cálculos en química cuántica. Veamos algunos ejemplos con los que podremos visualizar la aplicación de los conceptos que en esta ocasión se mencionan o se discuten.

Consideremos el ejemplo del aminoácido cisteína, como se ilustra en la figura 1, ¿cómo producimos la imagen? Sentémonos frente a una computadora e iniciemos el *programa de química cuántica*. Del menú que proporciona el programa, seleccionemos una molécula cualquiera en la cual un átomo de carbono (C) esté enlazado con un átomo de hidrógeno (H); un grupo amino (NH₂) con

un grupo tiolometil (CH₂SH) y con un grupo carboxilo (COOH), entonces la computadora obtiene una imagen sobre la pantalla. Después instruyamos a la computadora para que determine la geometría de la molécula con un cálculo químico cuántico. Esto puede tomar unos minutos si es suficiente con un valor aproximado, o puede tomar días si deseamos un resultado de alta precisión.

La imagen en la pantalla gradualmente cambiará hacia contornos de mayor precisión de acuerdo con niveles predeterminados. Cuando esta operación se concluya podemos instruir a la computadora para que efectúe el cálculo de las diferentes propiedades del sistema. En la ilustración que se muestra se ha calculado una superficie con una densidad electrónica constante; ésta será coloreada

da de acuerdo con el valor del potencial electrostático. Esto se puede utilizar por ejemplo para predecir cómo las moléculas interactúan con otras, así como con cargas presentes en su entorno; en nuestro caso se puede utilizar para estudiar cómo las proteínas (formadas de aminoácidos) interaccionan con diferentes substratos en fármacos (Royal, 1998).

Otro ejemplo puede ser tomado del universo, en el cual, además de estrellas y planetas, existe una gran cantidad de materia interestelar, a menudo aglomerada en vastas nubes, pero ¿de qué consiste esta materia?, la cual puede ser estudiada desde nuestro planeta a través de la radiación que emiten las moléculas. La radiación se genera por la rotación y vibración de las moléculas, así que es posible utilizar el espectro de frecuencias de la radiación para determinar la composición y conformación espacial de las moléculas. Sin embargo, esto es una inmensa y difícil tarea, particularmente debido a que tales moléculas no siempre pueden ser producidas en el laboratorio con el fin de obtener un material que nos permita hacer estudios comparativos.

La química cuántica no sufre de ta-

les limitaciones, los cálculos basados sobre estructuras consideradas proporcionan información sobre frecuencias de radioemisión que pueden ser directamente comparadas con los datos colectados en los radiotelescopios. De esta forma la teoría, junto con las determinaciones, nos permite obtener información sobre la composición molecular de la materia interestelar.

Otro ejemplo: sabemos que en las partes superiores de la atmósfera existe una capa delgada de moléculas de ozono (figura 2) que protegen tanto al planeta como a nosotros de la radiación ultravioleta proveniente del Sol. Además, los habitantes de la tierra liberamos como desechos antropogénicos sustancias nocivas, como los freones (compuestos de cloro-fluorocarbonos), que pueden ocasionar la destrucción de dicha capa. Pero, ¿cómo sucede esto?, ¿cuáles reacciones químicas están involucradas? Con la química cuántica computacional podemos describir a detalle estas reacciones que suceden en la atmósfera alta y comprender el mecanismo de interacción de su cinética molecular. Este conocimiento quizás

puede ayudarnos a tomar conciencia del riesgo monumental que nuestras acciones implican, e iniciar la toma de decisiones encaminadas hacia acciones que permitan tener una atmósfera vital necesariamente limpia.

En nuestros días, la química cuántica es utilizada prácticamente en todas las ramas de la química, siempre con el propósito de incrementar nuestro saber acerca de la estructura íntima de la materia existente, donde finalmente el conocimiento se conforma como una unidad. El trabajo científico de Walter Kohn y John Pople constituye un punto crucial para el desenvolvimiento de esta nueva área de investigación, razón por la cual, en esta ocasión, son merecedores del más distinguido reconocimiento. 🏆

BIBLIOGRAFÍA

- Goss-Levi, B. (1998). *Physics Today*. Vol. 51, Núm. 12. Diciembre. Documento base.
- Hohenberg, P. y Kohn, W. (1964). *Phys. Rev. B* Vol. 136.
- Hohenberg, P.; Kohn, W. y Sham, L. (1990). *Adv. in Quantum Chem.* Vol. 21. Núm. 7.
- Ira Levine, N. (1974). *Quantum Chemistry*. Allyn and Bacon, Estados Unidos.
- Krieger, J. (1997). "Computational Chemistry Impact", en *Chem. & Eng. News*. Mayo 12.
- Kohn, W. y Sham, L. (1965). *Phys. Rev. A*. Vol. 140, 1133.
- Parr, W. y Yang, W. (1989). *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford Science, Oxford.
- Pilar, Frank. (1968). *Elementary Quantum Chemistry*. McGraw-Hill, Estados Unidos.
- Royal Swedish Academy of Sciences (1998). *Information Department*. Box 50005, SE-10405 Stockholm, Sweden. Documento base.
- Segré, E. (1983). *De los rayos x a los quarks*. 1ª edición. Folios Ediciones, México.
- Wilson, E. (1996). "Theoretical Chemistry Expands and Diversifies Across Chemical Disciplines", en *Chem. & Eng. News*. Agosto 19.

FIGURA 2. EN LAS PARTES SUPERIORES DE LA ATMÓSFERA DONDE SE LOCALIZA LA CAPA DE OZONO QUE NOS PROTEGE DE LA RADIACIÓN UV SOLAR, ESTÁN PRESENTES MOLÉCULAS DE COMPUESTOS DE CLORO-FLUOROCARBONOS (CF₂CL₂), FIGURA IZQUIERDA, QUE POR REACCIONES QUÍMICAS SON CAPACES DE DESCOMPONER LAS MOLÉCULAS DE OZONO (O₃), FIGURA DERECHA, MEDIANTE LA REACCIÓN DE ÁTOMOS LIBRES DE CLORO CON MOLÉCULAS DE O₃. ESTOS PROCESOS SE PUEDEN ESTUDIAR UTILIZANDO CÁLCULOS DE QUÍMICA CUÁNTICA.

